



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 05:52 AM GMT

PDB ID : 2ULL
Title : MULTIPLE CONFORMATION STRUCTURE OF ALPHA-LYTIC PROTEASE AT 120 K
Authors : Rader, S.D.; Agard, D.A.
Deposited on : 1996-11-26
Resolution : 1.50 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/XrayValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692
EDS : rb-20026688
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Refmac : 5.8.0135
CCP4 : 6.5.0
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

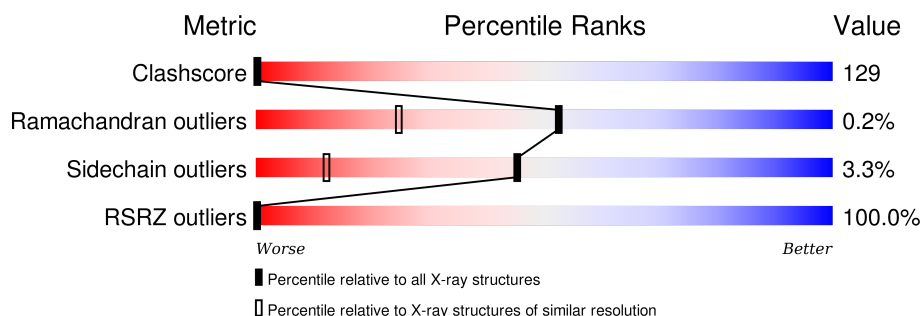
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 1.50 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	102246	2274 (1.50-1.50)
Ramachandran outliers	100387	2218 (1.50-1.50)
Sidechain outliers	100360	2216 (1.50-1.50)
RSRZ outliers	91569	2075 (1.50-1.50)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	1-A	198	<div> <div>100%</div> <div>97%</div> </div>
1	10-A	198	<div> <div>100%</div> <div>97%</div> </div>
1	11-A	198	<div> <div>100%</div> <div>98%</div> </div>
1	12-A	198	<div> <div>100%</div> <div>97%</div> </div>
1	13-A	198	<div> <div>100%</div> <div>97%</div> </div>
1	14-A	198	<div> <div>100%</div> <div>97%</div> </div>
1	15-A	198	<div> <div>100%</div> <div>97%</div> </div>

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	16-A	198	<div>100%</div> <div>97%</div>
1	2-A	198	<div>100%</div> <div>98%</div>
1	3-A	198	<div>100%</div> <div>98%</div>
1	4-A	198	<div>100%</div> <div>97%</div>
1	5-A	198	<div>100%</div> <div>96%</div>
1	6-A	198	<div>100%</div> <div>97%</div>
1	7-A	198	<div>100%</div> <div>97%</div>
1	8-A	198	<div>100%</div> <div>97%</div>
1	9-A	198	<div>100%</div> <div>97%</div>

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	SO4	1-A	3	-	-	-	X
2	SO4	1-A	4	-	X	-	X
2	SO4	10-A	2	-	-	-	X
2	SO4	10-A	3	-	-	-	X
2	SO4	10-A	4	-	X	-	X
2	SO4	11-A	3	-	-	-	X
2	SO4	11-A	4	-	X	-	X
2	SO4	12-A	3	-	-	-	X
2	SO4	12-A	4	-	X	-	X
2	SO4	13-A	3	-	-	-	X
2	SO4	13-A	4	-	X	-	X
2	SO4	14-A	2	-	-	-	X
2	SO4	14-A	3	-	-	-	X
2	SO4	14-A	4	-	X	-	X
2	SO4	15-A	3	-	-	-	X
2	SO4	15-A	4	-	X	-	X
2	SO4	16-A	3	-	-	-	X
2	SO4	16-A	4	-	X	-	X
2	SO4	2-A	3	-	-	-	X
2	SO4	2-A	4	-	X	-	X
2	SO4	3-A	2	-	-	-	X
2	SO4	3-A	3	-	-	-	X

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	SO4	3-A	4	-	X	-	X
2	SO4	4-A	2	-	-	-	X
2	SO4	4-A	3	-	-	-	X
2	SO4	4-A	4	-	X	-	X
2	SO4	5-A	3	-	-	-	X
2	SO4	5-A	4	-	X	-	X
2	SO4	6-A	3	-	-	-	X
2	SO4	6-A	4	-	X	-	X
2	SO4	7-A	3	-	-	-	X
2	SO4	7-A	4	-	X	-	X
2	SO4	8-A	3	-	-	-	X
2	SO4	8-A	4	-	X	-	X
2	SO4	9-A	3	-	-	-	X
2	SO4	9-A	4	-	X	-	X
3	TAM	1-A	1	-	-	-	X
3	TAM	10-A	1	-	-	-	X
3	TAM	11-A	1	-	-	-	X
3	TAM	12-A	1	-	-	-	X
3	TAM	13-A	1	-	-	-	X
3	TAM	14-A	1	-	-	-	X
3	TAM	15-A	1	-	-	-	X
3	TAM	16-A	1	-	-	-	X
3	TAM	2-A	1	-	-	-	X
3	TAM	3-A	1	-	-	-	X
3	TAM	4-A	1	-	-	-	X
3	TAM	5-A	1	-	-	-	X
3	TAM	6-A	1	-	-	-	X
3	TAM	7-A	1	-	-	-	X
3	TAM	8-A	1	-	-	-	X
3	TAM	9-A	1	-	-	-	X

2 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 27440 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called ALPHA-LYTIC PROTEASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	1-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	2-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	3-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	4-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	5-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	6-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	7-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	8-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	9-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	10-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	11-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	12-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	13-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	14-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	15-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			
1	16-A	198	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1391	846	262	275	8			

- Molecule 2 is SULFATE ION (three-letter code: SO4) (formula: O₄S).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
2	1-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	2-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	3-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	4-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	5-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	6-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	7-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	8-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	9-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	10-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	11-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	12-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	13-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

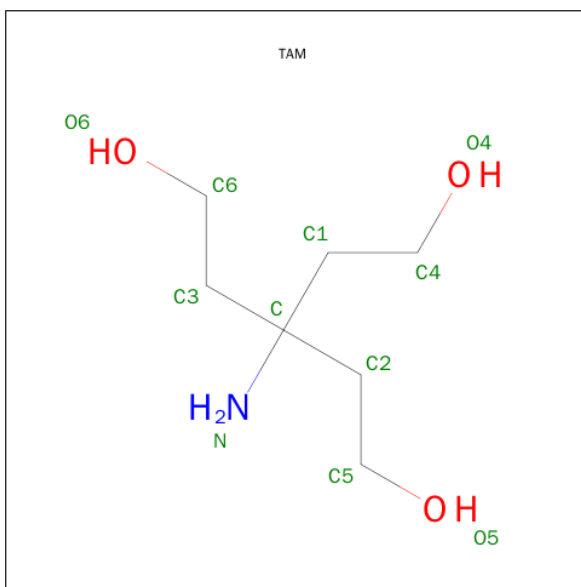
Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
2	14-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	15-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	16-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	1-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	2-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	3-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	4-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	5-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	6-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	7-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	8-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	9-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	10-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	11-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	12-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	13-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	14-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	15-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	16-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	1-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	2-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
2	3-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	4-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	5-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	6-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	7-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	8-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	9-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	10-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	11-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	12-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	13-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	14-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	15-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	16-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		

- Molecule 3 is TRIS(HYDROXYETHYL)AMINOMETHANE (three-letter code: TAM) (formula: C₇H₁₇NO₃).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
3	1-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	2-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	3-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	4-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	5-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	6-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	7-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	8-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	9-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	10-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	11-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	12-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	13-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	14-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
3	15-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		
3	16-A	1	Total	C	N	0	0
			8	7	1		

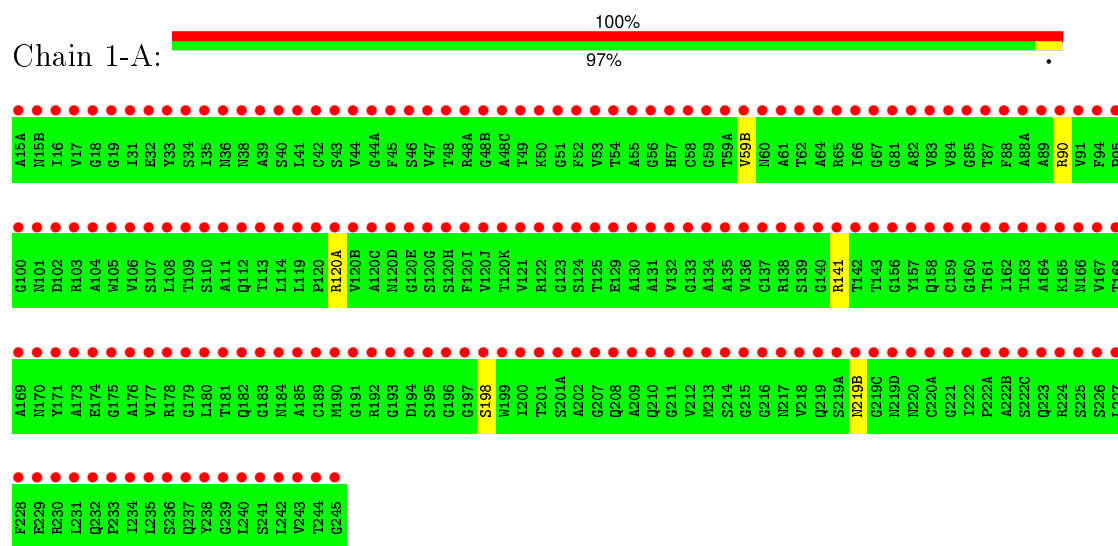
- Molecule 4 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	1-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	2-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	3-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	4-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	5-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	6-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	7-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	8-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	9-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	10-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	11-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	12-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	13-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	14-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	15-A	301	Total	O	2	0
			301	301		
4	16-A	301	Total	O	2	0
			301	301		

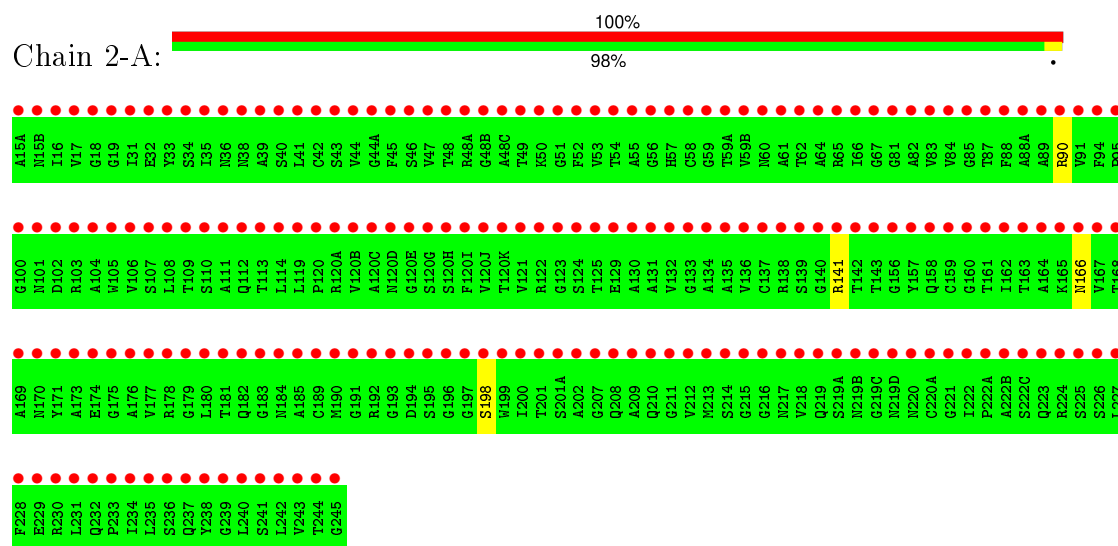
3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

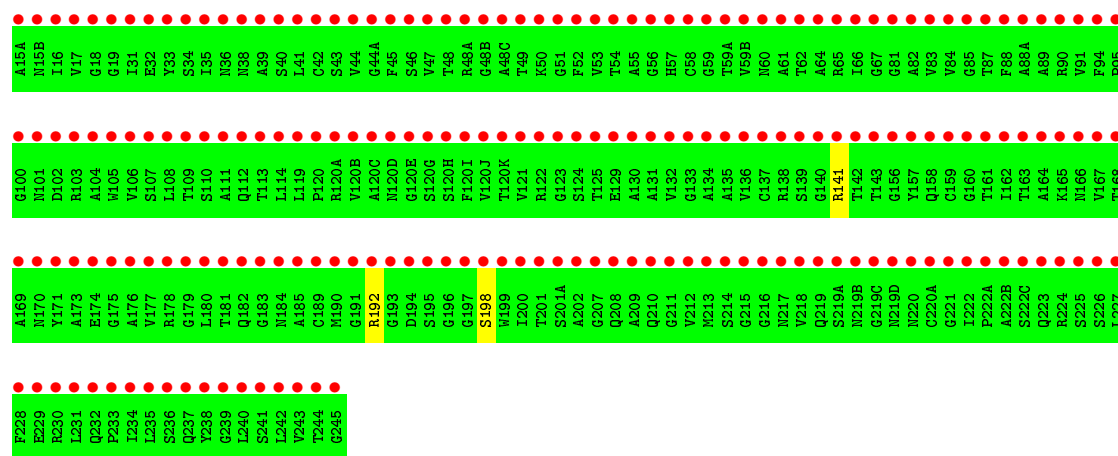


• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE



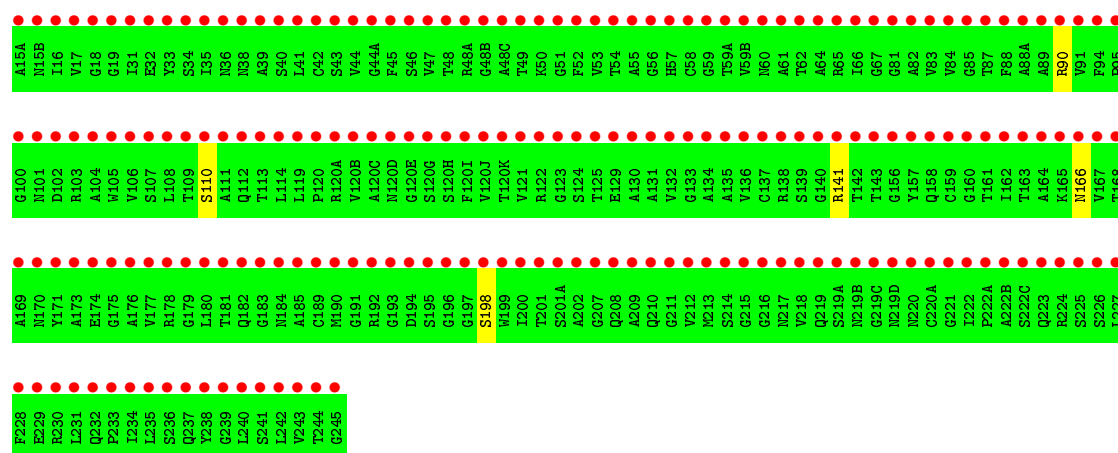
• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE





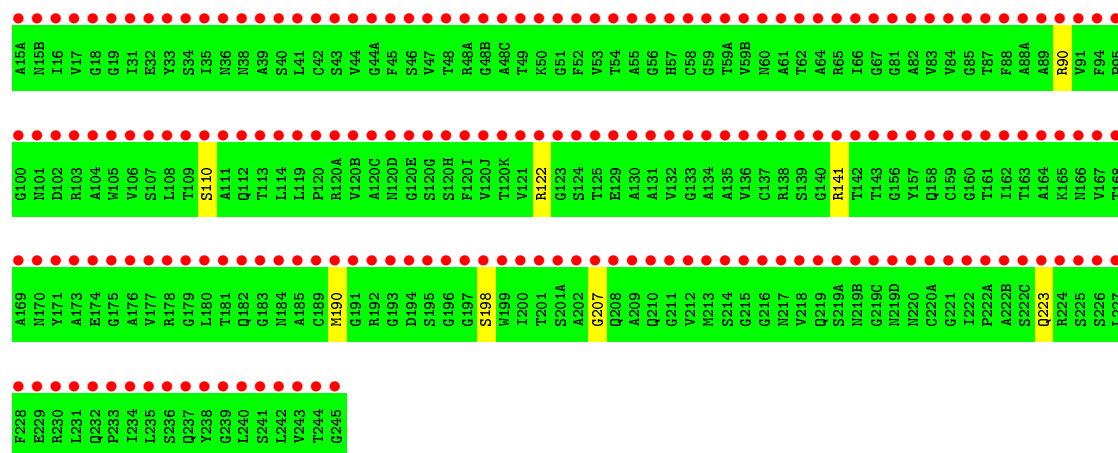
• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

Chain 4-A: 

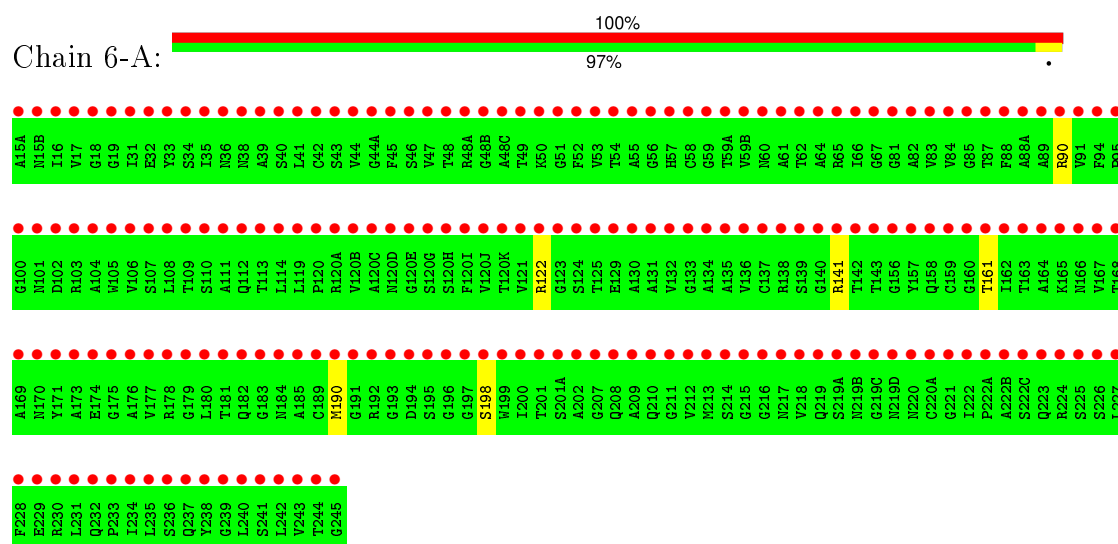


• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

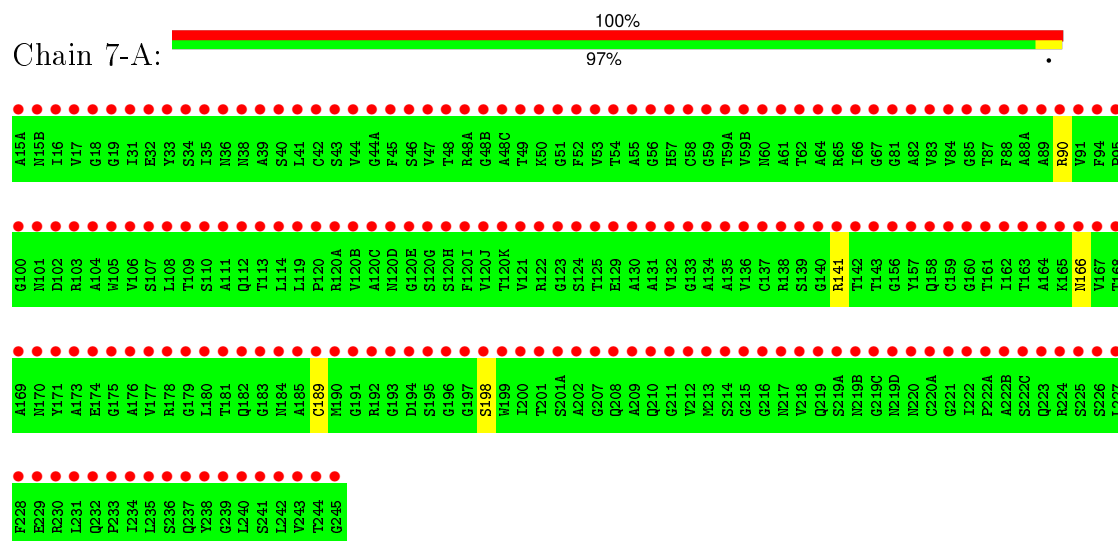
Chain 5-A: 



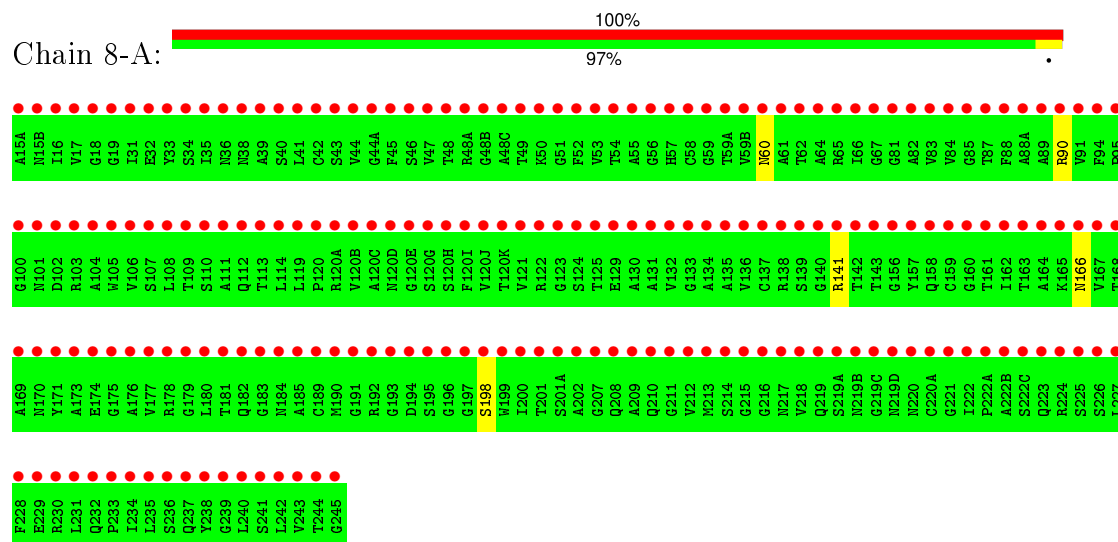
• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE



• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

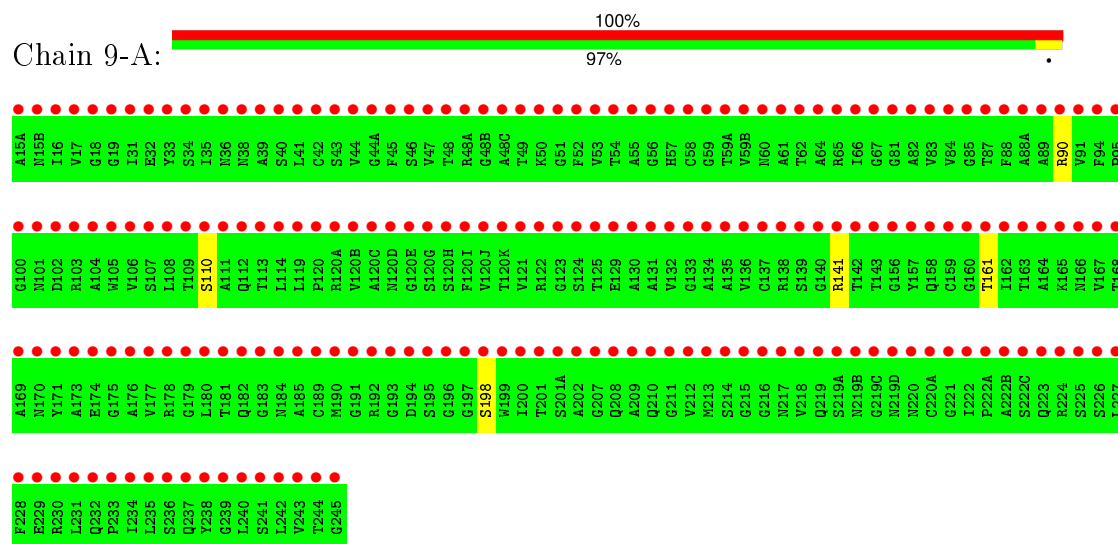


• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE



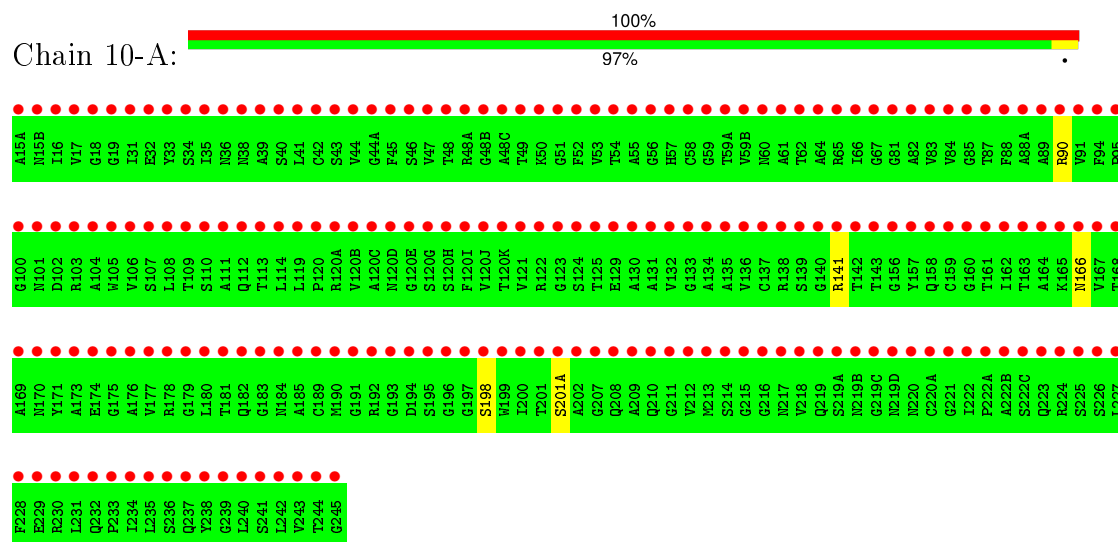
- Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

Chain 9-A:



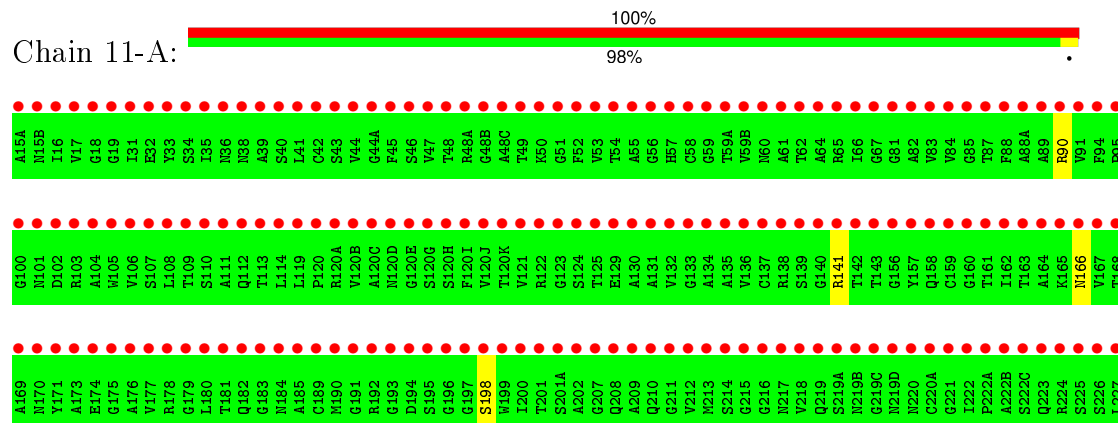
- Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

Chain 10-A:



- Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

Chain 11-A:



F228
E229
R230
L231
Q232
P233
I234
L235
Q237
Y238
G239
L240
S241
L242
V243
T244
G245

• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

Chain 12-A:  100%
97%

A15A
N15B
I16
V17
G18
G19
I31
E32
Y33
S34
I35
N36
N38
A39
S40
L41
C42
S43
V44
G44A
F45
S46
V47
T48
R48A
F120I
G48B
A48C
T49
K50
G51
F52
V53
T54
A55
G56
H57
C58
G59
T59A
V59B
N60
A61
T62
T63
R65
I66
G67
G81
A82
V83
V84
G85
T87
F88
A88A
A89
R90
V91
F94
P95

G100
N101
D102
R103
A104
W105
V106
S107
L108
T109
S110
I111
Q112
T113
L114
L119
P120
C121
R120A
V120B
A120C
M120D
G120E
S120G
S120H
F120I
V120J
T120K
V121
R122
G123
S124
T125
E129
A130
A131
V132
G133
A134
A135
V136
C137
R138
S139
G140
R141
T142
T143
G156
Y157
Q158
C159
G160
T161
I162
T163
A164
K165
M166
V167
T168

A169
M170
Y171
A174
G175
A176
V177
R178
G179
L180
T181
Q182
G183
M184
A185
C189
M190
G191
R192
G193
D194
S195
G196
S198
W199
L200
T201
S201A
A202
G207
Q208
A209
Q210
G211
V212
V213
S214
G215
G216
N217
V218
Q219
S219A
N219B
G219C
N219D
N220
C220A
G221
I222
P222A
F222B
S222C
Q223
R224
S225
S226
L227

F228
E229
R230
L231
Q232
P233
I234
L235
Q237
Y238
G239
L240
S241
L242
V243
T244
G245

• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

Chain 13-A:  100%
97%

A15A
N15B
I16
V17
G18
G19
I31
E32
Y33
S34
I35
N36
N38
A39
S40
L41
C42
S43
V44
G44A
F45
S46
V47
T48
R48A
F120I
G48B
A48C
T49
K50
G51
F52
V53
T54
A55
G56
H57
C58
G59
T59A
V59B
N60
A61
T62
T63
R65
I66
G67
G81
A82
V83
V84
G85
T87
F88
A88A
A89
R90
V91
F94
P95

G100
N101
D102
R103
A104
W105
V106
S107
L108
T109
S110
I111
Q112
T113
L114
L119
P120
C121
R120A
V120B
A120C
M120D
G120E
S120G
S120H
F120I
V120J
T120K
V121
R122
G123
S124
T125
E129
A130
A131
V132
G133
A134
A135
V136
C137
R138
S139
G140
R141
T142
T143
G156
Y157
Q158
C159
G160
T161
I162
T163
A164
K165
M166
V167
T168

A169
M170
Y171
A174
G175
A176
V177
R178
G179
L180
T181
Q182
G183
M184
A185
C189
M190
G191
R192
G193
D194
S195
G196
S198
W199
L200
T201
S201A
A202
G207
Q208
A209
Q210
G211
V212
V213
S214
G215
G216
N217
V218
Q219
S219A
N219B
G219C
N219D
N220
C220A
G221
I222
P222A
F222B
S222C
Q223
R224
S225
S226
L227

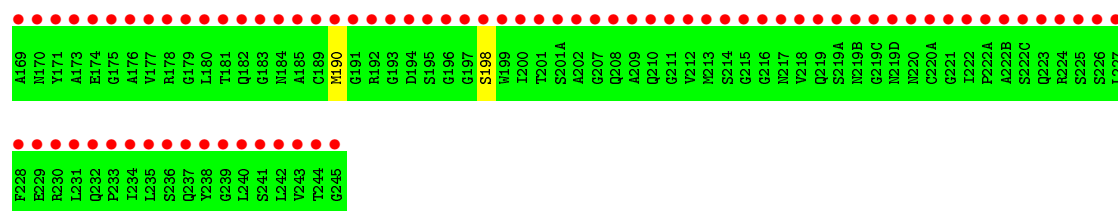
F228
E229
R230
L231
Q232
P233
I234
L235
Q237
Y238
G239
L240
S241
L242
V243
T244
G245

• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE

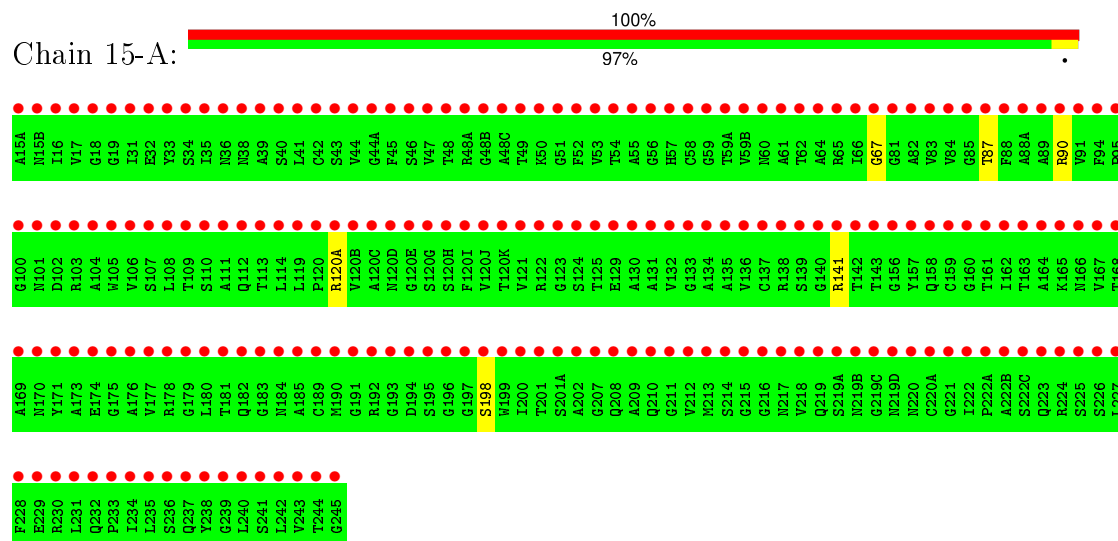
Chain 14-A:  100%
97%

A15A
N15B
I16
V17
G18
G19
I31
E32
Y33
S34
I35
N36
N38
A39
S40
L41
C42
S43
V44
G44A
F45
S46
V47
T48
R48A
F120I
G48B
A48C
T49
K50
G51
F52
V53
T54
A55
G56
H57
C58
G59
T59A
V59B
N60
A61
T62
T63
R65
I66
G67
G81
A82
V83
V84
G85
T87
F88
A88A
A89
R90
V91
F94
P95

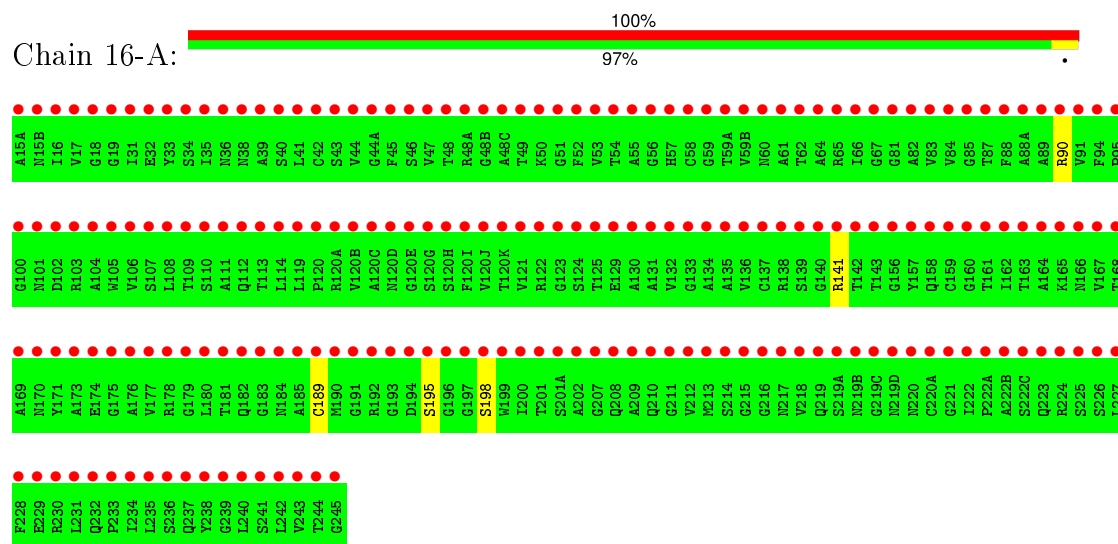
G100
N101
D102
R103
A104
W105
V106
S107
L108
T109
S110
I111
Q112
T113
L114
L119
P120
C121
R120A
V120B
A120C
M120D
G120E
S120G
S120H
F120I
V120J
T120K
V121
R122
G123
S124
T125
E129
A130
A131
V132
G133
A134
A135
V136
C137
R138
S139
G140
R141
T142
T143
G156
Y157
Q158
C159
G160
T161
I162
T163
A164
K165
M166
V167
T168



• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE



• Molecule 1: ALPHA-LYTIC PROTEASE



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 32 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	65.80 Å 65.80 Å 79.50 Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	6.00 – 1.50 13.57 – 1.48	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.0 (6.00-1.50) 98.5 (13.57-1.48)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	0.06	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	5.50 (at 1.48 Å)	Xtriage
Refinement program	X-PLOR	Depositor
R, R_{free}	0.165 , 0.192 0.501 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	5.5	Xtriage
Anisotropy	0.098	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	1.38 , 7.5	EDS
Estimated twinning fraction	0.032 for -h,-k,l	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.47$, $\langle L^2 \rangle = 0.30$	Xtriage
Outliers	0 of 33422 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.48	EDS
Total number of atoms	27440	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	6.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 6.20% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

²Theoretical values of $\langle |L| \rangle$, $\langle L^2 \rangle$ for acentric reflections are 0.5, 0.375 respectively for untwinned datasets, and 0.333, 0.2 for perfectly twinned datasets.

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: TAM, SO4

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	1-A	0.34	0/1409	0.69	0/1909
1	2-A	0.34	0/1409	0.69	0/1909
1	3-A	0.34	0/1409	0.68	0/1909
1	4-A	0.34	0/1409	0.70	0/1909
1	5-A	0.34	0/1409	0.70	1/1909 (0.1%)
1	6-A	0.36	0/1409	0.80	2/1909 (0.1%)
1	7-A	0.36	0/1409	0.69	0/1909
1	8-A	0.34	0/1409	0.69	0/1909
1	9-A	0.34	0/1409	0.69	0/1909
1	10-A	0.34	0/1409	0.69	0/1909
1	11-A	0.34	0/1409	0.69	0/1909
1	12-A	0.34	0/1409	0.67	0/1909
1	13-A	0.37	1/1409 (0.1%)	0.74	2/1909 (0.1%)
1	14-A	0.35	0/1409	0.70	0/1909
1	15-A	0.34	0/1409	0.71	1/1909 (0.1%)
1	16-A	0.34	0/1409	0.70	0/1909
All	All	0.35	1/22544 (0.0%)	0.70	6/30544 (0.0%)

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	13-A	48(A)	ARG	CZ-NH2	-5.97	1.25	1.33

All (6) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	6-A	122	ARG	NE-CZ-NH2	-14.31	113.14	120.30
1	13-A	48(A)	ARG	NE-CZ-NH1	9.44	125.02	120.30
1	6-A	122	ARG	NH1-CZ-NH2	6.68	126.75	119.40
1	13-A	48(A)	ARG	NE-CZ-NH2	-6.44	117.08	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	15-A	120(A)	ARG	NE-CZ-NH2	-5.44	117.58	120.30
1	5-A	207	GLY	N-CA-C	5.17	126.03	113.10

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts ⓘ

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	1-A	1391	0	1363	0	0
1	2-A	1391	0	1361	0	0
1	3-A	1391	0	1363	0	0
1	4-A	1391	0	1361	0	0
1	5-A	1391	0	1363	0	0
1	6-A	1391	0	1363	0	0
1	7-A	1391	0	1365	0	0
1	8-A	1391	0	1361	0	0
1	9-A	1391	0	1363	0	0
1	10-A	1391	0	1363	0	0
1	11-A	1391	0	1361	0	0
1	12-A	1391	0	1361	0	0
1	13-A	1391	0	1363	0	0
1	14-A	1391	0	1361	0	0
1	15-A	1391	0	1361	0	0
1	16-A	1391	0	1363	0	0
2	1-A	15	0	0	0	0
2	2-A	15	0	0	0	0
2	3-A	15	0	0	0	0
2	4-A	15	0	0	0	0
2	5-A	15	0	0	0	0
2	6-A	15	0	0	0	0
2	7-A	15	0	0	0	0
2	8-A	15	0	0	0	0
2	9-A	15	0	0	0	0
2	10-A	15	0	0	0	0
2	11-A	15	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	12-A	15	0	0	0	0
2	13-A	15	0	0	0	0
2	14-A	15	0	0	0	0
2	15-A	15	0	0	0	0
2	16-A	15	0	0	0	0
3	1-A	8	0	8	4	0
3	2-A	8	0	8	4	0
3	3-A	8	0	8	4	0
3	4-A	8	0	8	4	0
3	5-A	8	0	8	4	0
3	6-A	8	0	8	4	0
3	7-A	8	0	8	4	0
3	8-A	8	0	8	4	0
3	9-A	8	0	8	4	0
3	10-A	8	0	8	4	0
3	11-A	8	0	8	4	0
3	12-A	8	0	8	4	0
3	13-A	8	0	8	4	0
3	14-A	8	0	8	4	0
3	15-A	8	0	8	4	0
3	16-A	8	0	8	4	0
4	1-A	301	0	0	4	0
4	2-A	301	0	0	4	0
4	3-A	301	0	0	4	0
4	4-A	301	0	0	4	0
4	5-A	301	0	0	4	0
4	6-A	301	0	0	4	0
4	7-A	301	0	0	4	0
4	8-A	301	0	0	4	0
4	9-A	301	0	0	4	0
4	10-A	301	0	0	4	0
4	11-A	301	0	0	4	0
4	12-A	301	0	0	4	0
4	13-A	301	0	0	4	0
4	14-A	301	0	0	4	0
4	15-A	301	0	0	4	0
4	16-A	301	0	0	4	0
All	All	27440	0	21924	64	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 129.

All (64) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

[illegible]

Continued on next page...

Continued from previous page...

[illegible]

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	1-A	196/198 (99%)	183 (93%)	12 (6%)	1 (0%)	34	10
1	2-A	196/198 (99%)	184 (94%)	12 (6%)	0	100	100
1	3-A	196/198 (99%)	184 (94%)	11 (6%)	1 (0%)	34	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	4-A	196/198 (99%)	182 (93%)	13 (7%)	1 (0%)	34	10
1	5-A	196/198 (99%)	185 (94%)	10 (5%)	1 (0%)	34	10
1	6-A	196/198 (99%)	185 (94%)	11 (6%)	0	100	100
1	7-A	196/198 (99%)	180 (92%)	16 (8%)	0	100	100
1	8-A	196/198 (99%)	186 (95%)	10 (5%)	0	100	100
1	9-A	196/198 (99%)	186 (95%)	10 (5%)	0	100	100
1	10-A	196/198 (99%)	187 (95%)	9 (5%)	0	100	100
1	11-A	196/198 (99%)	187 (95%)	9 (5%)	0	100	100
1	12-A	196/198 (99%)	184 (94%)	12 (6%)	0	100	100
1	13-A	196/198 (99%)	188 (96%)	8 (4%)	0	100	100
1	14-A	196/198 (99%)	184 (94%)	12 (6%)	0	100	100
1	15-A	196/198 (99%)	184 (94%)	11 (6%)	1 (0%)	34	10
1	16-A	196/198 (99%)	183 (93%)	13 (7%)	0	100	100
All	All	3136/3168 (99%)	2952 (94%)	179 (6%)	5 (0%)	52	25

All (5) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	110	SER
1	15-A	67	GLY
1	4-A	110	SER
1	3-A	192	ARG
1	1-A	59(B)	VAL

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	1-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
1	2-A	142/142 (100%)	138 (97%)	4 (3%)	51	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	3-A	142/142 (100%)	140 (99%)	2 (1%)	74	47
1	4-A	142/142 (100%)	138 (97%)	4 (3%)	51	17
1	5-A	142/142 (100%)	136 (96%)	6 (4%)	36	7
1	6-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
1	7-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
1	8-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
1	9-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
1	10-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
1	11-A	142/142 (100%)	138 (97%)	4 (3%)	51	17
1	12-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
1	13-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
1	14-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
1	15-A	142/142 (100%)	138 (97%)	4 (3%)	51	17
1	16-A	142/142 (100%)	137 (96%)	5 (4%)	43	11
All	All	2272/2272 (100%)	2198 (97%)	74 (3%)	45	12

All (74) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	90	ARG
1	1-A	120(A)	ARG
1	1-A	141	ARG
1	1-A	198	SER
1	1-A	219(B)	ASN
1	2-A	90	ARG
1	2-A	141	ARG
1	2-A	166	ASN
1	2-A	198	SER
1	3-A	141	ARG
1	3-A	198	SER
1	4-A	90	ARG
1	4-A	141	ARG
1	4-A	166	ASN
1	4-A	198	SER
1	5-A	90	ARG
1	5-A	122	ARG
1	5-A	141	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	190	MET
1	5-A	198	SER
1	5-A	223	GLN
1	6-A	90	ARG
1	6-A	141	ARG
1	6-A	161	THR
1	6-A	190	MET
1	6-A	198	SER
1	7-A	90	ARG
1	7-A	141	ARG
1	7-A	166	ASN
1	7-A	189	CYS
1	7-A	198	SER
1	8-A	60	ASN
1	8-A	90	ARG
1	8-A	141	ARG
1	8-A	166	ASN
1	8-A	198	SER
1	9-A	90	ARG
1	9-A	110	SER
1	9-A	141	ARG
1	9-A	161	THR
1	9-A	198	SER
1	10-A	90	ARG
1	10-A	141	ARG
1	10-A	166	ASN
1	10-A	198	SER
1	10-A	201(A)	SER
1	11-A	90	ARG
1	11-A	141	ARG
1	11-A	166	ASN
1	11-A	198	SER
1	12-A	90	ARG
1	12-A	141	ARG
1	12-A	161	THR
1	12-A	166	ASN
1	12-A	198	SER
1	13-A	90	ARG
1	13-A	109	THR
1	13-A	141	ARG
1	13-A	198	SER
1	13-A	223	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	90	ARG
1	14-A	141	ARG
1	14-A	166	ASN
1	14-A	190	MET
1	14-A	198	SER
1	15-A	87	THR
1	15-A	90	ARG
1	15-A	141	ARG
1	15-A	198	SER
1	16-A	90	ARG
1	16-A	141	ARG
1	16-A	189	CYS
1	16-A	195	SER
1	16-A	198	SER

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (47) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	101	ASN
1	1-A	166	ASN
1	1-A	219(B)	ASN
1	2-A	60	ASN
1	2-A	101	ASN
1	2-A	166	ASN
1	3-A	60	ASN
1	3-A	101	ASN
1	3-A	166	ASN
1	4-A	60	ASN
1	4-A	101	ASN
1	4-A	166	ASN
1	5-A	60	ASN
1	5-A	101	ASN
1	5-A	166	ASN
1	5-A	223	GLN
1	6-A	60	ASN
1	6-A	166	ASN
1	6-A	182	GLN
1	7-A	60	ASN
1	8-A	101	ASN
1	9-A	101	ASN
1	9-A	182	GLN
1	10-A	60	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	166	ASN
1	10-A	170	ASN
1	11-A	101	ASN
1	11-A	158	GLN
1	11-A	166	ASN
1	12-A	60	ASN
1	12-A	101	ASN
1	12-A	166	ASN
1	13-A	101	ASN
1	13-A	112	GLN
1	13-A	166	ASN
1	13-A	182	GLN
1	13-A	223	GLN
1	14-A	60	ASN
1	14-A	101	ASN
1	14-A	166	ASN
1	14-A	182	GLN
1	15-A	101	ASN
1	15-A	166	ASN
1	15-A	232	GLN
1	16-A	60	ASN
1	16-A	166	ASN
1	16-A	182	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

64 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
3	TAM	1-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	1-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	1-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	1-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	10-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	10-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	10-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	10-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	11-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	11-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	11-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	11-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	12-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	12-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	12-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	12-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	13-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	13-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	13-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	13-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	14-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	14-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	14-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	14-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	15-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	15-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	15-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	15-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	16-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	SO4	16-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	16-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	16-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	2-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	2-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	2-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	2-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	3-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	3-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	3-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	3-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	4-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	4-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	4-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	4-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	5-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	5-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	5-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	5-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	6-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	6-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	6-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	6-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	7-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	7-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	7-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	7-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	8-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	8-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	8-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	8-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)
3	TAM	9-A	1	-	7,7,10	1.76	3 (42%)	6,9,12	6.35	4 (66%)
2	SO4	9-A	2	-	4,4,4	1.96	1 (25%)	6,6,6	1.50	1 (16%)
2	SO4	9-A	3	-	4,4,4	2.64	3 (75%)	6,6,6	0.68	0
2	SO4	9-A	4	-	4,4,4	3.21	3 (75%)	6,6,6	4.06	4 (66%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	TAM	1-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	1-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	1-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	1-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	10-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	10-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	10-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	10-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	11-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	11-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	11-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	11-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	12-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	12-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	12-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	12-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	13-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	13-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	13-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	13-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	14-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	14-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	14-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	14-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	15-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	15-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	15-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	15-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	16-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	16-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	16-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	16-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	2-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	2-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	2-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	2-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	3-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	3-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	3-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	SO4	3-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	4-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	4-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	4-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	4-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	5-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	5-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	5-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	5-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	6-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	6-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	6-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	6-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	7-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	7-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	7-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	7-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	8-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	8-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	8-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	8-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	TAM	9-A	1	-	-	0/9/9/12	0/0/0/0
2	SO4	9-A	2	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	9-A	3	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	9-A	4	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0

All (160) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	2-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	6-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	12-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	3-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	8-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	14-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	13-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	1-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	9-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	11-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	5-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	16-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	4-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	15-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	7-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	10-A	4	SO4	O2-S	-4.22	1.32	1.47
2	2-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	6-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	12-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	3-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	8-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	14-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	13-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	1-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	9-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	11-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	5-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	16-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	4-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	15-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	7-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	10-A	4	SO4	O3-S	-3.42	1.35	1.47
2	7-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	16-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	3-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	2-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	13-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	1-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	12-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	4-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	14-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	9-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	10-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	5-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	8-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	15-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	11-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	6-A	2	SO4	O3-S	-3.35	1.35	1.47
2	2-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	6-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	12-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	3-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	8-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	14-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	13-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	1-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	9-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	11-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	5-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	16-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	4-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	15-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	7-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
2	10-A	4	SO4	O4-S	-2.98	1.36	1.47
3	6-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	8-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	2-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	10-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	3-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	14-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	11-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	15-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	5-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	1-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	9-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	7-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	16-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	12-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	13-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
3	4-A	1	TAM	C5-C2	-2.60	1.40	1.51
2	1-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	13-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	6-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	11-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	16-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	12-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	4-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	8-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	7-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	10-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	3-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	9-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	2-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	5-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	15-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
2	14-A	3	SO4	O3-S	-2.50	1.38	1.47
3	6-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	8-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	2-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	10-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	3-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	14-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	11-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	15-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	5-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	1-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	9-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	7-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	16-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	12-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	13-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	4-A	1	TAM	C-N	-2.42	1.41	1.49
3	6-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	8-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	2-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	10-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	3-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	14-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	11-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	15-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	5-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	1-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	9-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	7-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	16-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	12-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	13-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
3	4-A	1	TAM	C6-C3	-2.21	1.41	1.51
2	1-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	13-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	6-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	11-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	16-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	12-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	4-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	8-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	7-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	10-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	3-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	9-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	2-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	5-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	15-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	14-A	3	SO4	O2-S	-2.08	1.40	1.47
2	1-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	13-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	6-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	11-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	16-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	12-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	4-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	8-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	7-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	10-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	3-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	9-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	2-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	5-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	15-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47
2	14-A	3	SO4	O1-S	3.96	1.60	1.47

All (144) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	2-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	6-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	12-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	3-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	8-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	14-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	13-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	1-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	9-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	11-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	5-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	16-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	4-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	15-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	7-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	10-A	4	SO4	O2-S-O1	-5.86	90.91	109.50
2	2-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	6-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	12-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	3-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	8-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	14-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	13-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	1-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	9-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	11-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	5-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	16-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	4-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	15-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	7-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
2	10-A	4	SO4	O3-S-O1	-5.85	55.72	110.19
3	6-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	8-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	2-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	10-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	3-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	14-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	11-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	15-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	5-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	1-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	9-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	7-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	16-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	12-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	13-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	4-A	1	TAM	C1-C-N	-5.42	97.09	108.28
3	6-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	8-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	2-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	10-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	3-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	14-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	11-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	15-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	5-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	1-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	9-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	7-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	16-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	12-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	13-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	4-A	1	TAM	C3-C-C2	-4.84	102.20	110.67
3	6-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	8-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	2-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	10-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	3-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	14-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	11-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	15-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	5-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	1-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	9-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	7-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	16-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	12-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	13-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
3	4-A	1	TAM	C2-C-C1	-2.97	105.47	110.67
2	7-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	16-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	3-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	2-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	13-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	1-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	12-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	4-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	14-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	9-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	10-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	5-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	8-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	15-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	11-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	6-A	2	SO4	O3-S-O1	-2.72	84.85	110.19
2	2-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	6-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	12-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	3-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	8-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	14-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	13-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	1-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	9-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	11-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	5-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	16-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	4-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	15-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	7-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	10-A	4	SO4	O4-S-O3	3.19	121.95	108.98
2	2-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	6-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	12-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	3-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	8-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	14-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	13-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	1-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	9-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	11-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	5-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	16-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	4-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	15-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	7-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
2	10-A	4	SO4	O4-S-O1	4.23	149.53	110.19
3	6-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	8-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	2-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	10-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	3-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	14-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	11-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	15-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	5-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	1-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	9-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	7-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	16-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	12-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67
3	13-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed($^{\circ}$)	Ideal($^{\circ}$)
3	4-A	1	TAM	C3-C-C1	13.43	134.15	110.67

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

16 monomers are involved in 64 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	1-A	1	TAM	4	0
3	10-A	1	TAM	4	0
3	11-A	1	TAM	4	0
3	12-A	1	TAM	4	0
3	13-A	1	TAM	4	0
3	14-A	1	TAM	4	0
3	15-A	1	TAM	4	0
3	16-A	1	TAM	4	0
3	2-A	1	TAM	4	0
3	3-A	1	TAM	4	0
3	4-A	1	TAM	4	0
3	5-A	1	TAM	4	0
3	6-A	1	TAM	4	0
3	7-A	1	TAM	4	0
3	8-A	1	TAM	4	0
3	9-A	1	TAM	4	0

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ> 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	1-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	2-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	3-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	4-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	5-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	6-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	7-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	8-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	9-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	10-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	11-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	12-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	13-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	14-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	15-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
1	16-A	198/198 (100%)	11.63	198 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	198 (100%)
All	All	3168/3168 (100%)	11.63	3168 (100%) 0 0	3, 3, 3, 3	3168 (100%)

All (3168) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	173	ALA	23.5
1	2-A	173	ALA	23.5
1	3-A	173	ALA	23.5
1	4-A	173	ALA	23.5
1	5-A	173	ALA	23.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	173	ALA	23.5
1	7-A	173	ALA	23.5
1	8-A	173	ALA	23.5
1	9-A	173	ALA	23.5
1	10-A	173	ALA	23.5
1	11-A	173	ALA	23.5
1	12-A	173	ALA	23.5
1	13-A	173	ALA	23.5
1	14-A	173	ALA	23.5
1	15-A	173	ALA	23.5
1	16-A	173	ALA	23.5
1	1-A	218	VAL	23.2
1	2-A	218	VAL	23.2
1	3-A	218	VAL	23.2
1	4-A	218	VAL	23.2
1	5-A	218	VAL	23.2
1	6-A	218	VAL	23.2
1	7-A	218	VAL	23.2
1	8-A	218	VAL	23.2
1	9-A	218	VAL	23.2
1	10-A	218	VAL	23.2
1	11-A	218	VAL	23.2
1	12-A	218	VAL	23.2
1	13-A	218	VAL	23.2
1	14-A	218	VAL	23.2
1	15-A	218	VAL	23.2
1	16-A	218	VAL	23.2
1	1-A	202	ALA	21.9
1	2-A	202	ALA	21.9
1	3-A	202	ALA	21.9
1	4-A	202	ALA	21.9
1	5-A	202	ALA	21.9
1	6-A	202	ALA	21.9
1	7-A	202	ALA	21.9
1	8-A	202	ALA	21.9
1	9-A	202	ALA	21.9
1	10-A	202	ALA	21.9
1	11-A	202	ALA	21.9
1	12-A	202	ALA	21.9
1	13-A	202	ALA	21.9
1	14-A	202	ALA	21.9
1	15-A	202	ALA	21.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	202	ALA	21.9
1	1-A	171	TYR	21.0
1	2-A	171	TYR	21.0
1	3-A	171	TYR	21.0
1	4-A	171	TYR	21.0
1	5-A	171	TYR	21.0
1	6-A	171	TYR	21.0
1	7-A	171	TYR	21.0
1	8-A	171	TYR	21.0
1	9-A	171	TYR	21.0
1	10-A	171	TYR	21.0
1	11-A	171	TYR	21.0
1	12-A	171	TYR	21.0
1	13-A	171	TYR	21.0
1	14-A	171	TYR	21.0
1	15-A	171	TYR	21.0
1	16-A	171	TYR	21.0
1	1-A	91	VAL	20.7
1	2-A	91	VAL	20.7
1	3-A	91	VAL	20.7
1	4-A	91	VAL	20.7
1	5-A	91	VAL	20.7
1	6-A	91	VAL	20.7
1	7-A	91	VAL	20.7
1	8-A	91	VAL	20.7
1	9-A	91	VAL	20.7
1	10-A	91	VAL	20.7
1	11-A	91	VAL	20.7
1	12-A	91	VAL	20.7
1	13-A	91	VAL	20.7
1	14-A	91	VAL	20.7
1	15-A	91	VAL	20.7
1	16-A	91	VAL	20.7
1	1-A	157	TYR	20.1
1	2-A	157	TYR	20.1
1	3-A	157	TYR	20.1
1	4-A	157	TYR	20.1
1	5-A	157	TYR	20.1
1	6-A	157	TYR	20.1
1	7-A	157	TYR	20.1
1	8-A	157	TYR	20.1
1	9-A	157	TYR	20.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	157	TYR	20.1
1	11-A	157	TYR	20.1
1	12-A	157	TYR	20.1
1	13-A	157	TYR	20.1
1	14-A	157	TYR	20.1
1	15-A	157	TYR	20.1
1	16-A	157	TYR	20.1
1	1-A	120(G)	SER	18.8
1	2-A	120(G)	SER	18.8
1	3-A	120(G)	SER	18.8
1	4-A	120(G)	SER	18.8
1	5-A	120(G)	SER	18.8
1	6-A	120(G)	SER	18.8
1	7-A	120(G)	SER	18.8
1	8-A	120(G)	SER	18.8
1	9-A	120(G)	SER	18.8
1	10-A	120(G)	SER	18.8
1	11-A	120(G)	SER	18.8
1	12-A	120(G)	SER	18.8
1	13-A	120(G)	SER	18.8
1	14-A	120(G)	SER	18.8
1	15-A	120(G)	SER	18.8
1	16-A	120(G)	SER	18.8
1	1-A	15(A)	ALA	18.7
1	2-A	15(A)	ALA	18.7
1	3-A	15(A)	ALA	18.7
1	4-A	15(A)	ALA	18.7
1	5-A	15(A)	ALA	18.7
1	6-A	15(A)	ALA	18.7
1	7-A	15(A)	ALA	18.7
1	8-A	15(A)	ALA	18.7
1	9-A	15(A)	ALA	18.7
1	10-A	15(A)	ALA	18.7
1	11-A	15(A)	ALA	18.7
1	12-A	15(A)	ALA	18.7
1	13-A	15(A)	ALA	18.7
1	14-A	15(A)	ALA	18.7
1	15-A	15(A)	ALA	18.7
1	16-A	15(A)	ALA	18.7
1	1-A	41	LEU	18.7
1	2-A	41	LEU	18.7
1	3-A	41	LEU	18.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	41	LEU	18.7
1	5-A	41	LEU	18.7
1	6-A	41	LEU	18.7
1	7-A	41	LEU	18.7
1	8-A	41	LEU	18.7
1	9-A	41	LEU	18.7
1	10-A	41	LEU	18.7
1	11-A	41	LEU	18.7
1	12-A	41	LEU	18.7
1	13-A	41	LEU	18.7
1	14-A	41	LEU	18.7
1	15-A	41	LEU	18.7
1	16-A	41	LEU	18.7
1	1-A	219(A)	SER	18.0
1	2-A	219(A)	SER	18.0
1	3-A	219(A)	SER	18.0
1	4-A	219(A)	SER	18.0
1	5-A	219(A)	SER	18.0
1	6-A	219(A)	SER	18.0
1	7-A	219(A)	SER	18.0
1	8-A	219(A)	SER	18.0
1	9-A	219(A)	SER	18.0
1	10-A	219(A)	SER	18.0
1	11-A	219(A)	SER	18.0
1	12-A	219(A)	SER	18.0
1	13-A	219(A)	SER	18.0
1	14-A	219(A)	SER	18.0
1	15-A	219(A)	SER	18.0
1	16-A	219(A)	SER	18.0
1	1-A	48(C)	ALA	18.0
1	2-A	48(C)	ALA	18.0
1	3-A	48(C)	ALA	18.0
1	4-A	48(C)	ALA	18.0
1	5-A	48(C)	ALA	18.0
1	6-A	48(C)	ALA	18.0
1	7-A	48(C)	ALA	18.0
1	8-A	48(C)	ALA	18.0
1	9-A	48(C)	ALA	18.0
1	10-A	48(C)	ALA	18.0
1	11-A	48(C)	ALA	18.0
1	12-A	48(C)	ALA	18.0
1	13-A	48(C)	ALA	18.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	14-A	48(C)	ALA	18.0
1	15-A	48(C)	ALA	18.0
1	16-A	48(C)	ALA	18.0
1	1-A	59(B)	VAL	17.7
1	2-A	59(B)	VAL	17.7
1	3-A	59(B)	VAL	17.7
1	4-A	59(B)	VAL	17.7
1	5-A	59(B)	VAL	17.7
1	6-A	59(B)	VAL	17.7
1	7-A	59(B)	VAL	17.7
1	8-A	59(B)	VAL	17.7
1	9-A	59(B)	VAL	17.7
1	10-A	59(B)	VAL	17.7
1	11-A	59(B)	VAL	17.7
1	12-A	59(B)	VAL	17.7
1	13-A	59(B)	VAL	17.7
1	14-A	59(B)	VAL	17.7
1	15-A	59(B)	VAL	17.7
1	16-A	59(B)	VAL	17.7
1	1-A	83	VAL	17.6
1	2-A	83	VAL	17.6
1	3-A	83	VAL	17.6
1	4-A	83	VAL	17.6
1	5-A	83	VAL	17.6
1	6-A	83	VAL	17.6
1	7-A	83	VAL	17.6
1	8-A	83	VAL	17.6
1	9-A	83	VAL	17.6
1	10-A	83	VAL	17.6
1	11-A	83	VAL	17.6
1	12-A	83	VAL	17.6
1	13-A	83	VAL	17.6
1	14-A	83	VAL	17.6
1	15-A	83	VAL	17.6
1	16-A	83	VAL	17.6
1	1-A	35	ILE	17.5
1	2-A	35	ILE	17.5
1	3-A	35	ILE	17.5
1	4-A	35	ILE	17.5
1	5-A	35	ILE	17.5
1	6-A	35	ILE	17.5
1	7-A	35	ILE	17.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	35	ILE	17.5
1	9-A	35	ILE	17.5
1	10-A	35	ILE	17.5
1	11-A	35	ILE	17.5
1	12-A	35	ILE	17.5
1	13-A	35	ILE	17.5
1	14-A	35	ILE	17.5
1	15-A	35	ILE	17.5
1	16-A	35	ILE	17.5
1	1-A	120(I)	PHE	17.5
1	2-A	120(I)	PHE	17.5
1	3-A	120(I)	PHE	17.5
1	4-A	120(I)	PHE	17.5
1	5-A	120(I)	PHE	17.5
1	6-A	120(I)	PHE	17.5
1	7-A	120(I)	PHE	17.5
1	8-A	120(I)	PHE	17.5
1	9-A	120(I)	PHE	17.5
1	10-A	120(I)	PHE	17.5
1	11-A	120(I)	PHE	17.5
1	12-A	120(I)	PHE	17.5
1	13-A	120(I)	PHE	17.5
1	14-A	120(I)	PHE	17.5
1	15-A	120(I)	PHE	17.5
1	16-A	120(I)	PHE	17.5
1	1-A	189	CYS	17.3
1	2-A	189	CYS	17.3
1	3-A	189	CYS	17.3
1	4-A	189	CYS	17.3
1	5-A	189	CYS	17.3
1	6-A	189	CYS	17.3
1	7-A	189	CYS	17.3
1	8-A	189	CYS	17.3
1	9-A	189	CYS	17.3
1	10-A	189	CYS	17.3
1	11-A	189	CYS	17.3
1	12-A	189	CYS	17.3
1	13-A	189	CYS	17.3
1	14-A	189	CYS	17.3
1	15-A	189	CYS	17.3
1	16-A	189	CYS	17.3
1	1-A	132	VAL	17.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	132	VAL	17.1
1	3-A	132	VAL	17.1
1	4-A	132	VAL	17.1
1	5-A	132	VAL	17.1
1	6-A	132	VAL	17.1
1	7-A	132	VAL	17.1
1	8-A	132	VAL	17.1
1	9-A	132	VAL	17.1
1	10-A	132	VAL	17.1
1	11-A	132	VAL	17.1
1	12-A	132	VAL	17.1
1	13-A	132	VAL	17.1
1	14-A	132	VAL	17.1
1	15-A	132	VAL	17.1
1	16-A	132	VAL	17.1
1	1-A	39	ALA	17.1
1	2-A	39	ALA	17.1
1	3-A	39	ALA	17.1
1	4-A	39	ALA	17.1
1	5-A	39	ALA	17.1
1	6-A	39	ALA	17.1
1	7-A	39	ALA	17.1
1	8-A	39	ALA	17.1
1	9-A	39	ALA	17.1
1	10-A	39	ALA	17.1
1	11-A	39	ALA	17.1
1	12-A	39	ALA	17.1
1	13-A	39	ALA	17.1
1	14-A	39	ALA	17.1
1	15-A	39	ALA	17.1
1	16-A	39	ALA	17.1
1	1-A	31	ILE	16.8
1	2-A	31	ILE	16.8
1	3-A	31	ILE	16.8
1	4-A	31	ILE	16.8
1	5-A	31	ILE	16.8
1	6-A	31	ILE	16.8
1	7-A	31	ILE	16.8
1	8-A	31	ILE	16.8
1	9-A	31	ILE	16.8
1	10-A	31	ILE	16.8
1	11-A	31	ILE	16.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	31	ILE	16.8
1	13-A	31	ILE	16.8
1	14-A	31	ILE	16.8
1	15-A	31	ILE	16.8
1	16-A	31	ILE	16.8
1	1-A	120(E)	GLY	16.8
1	2-A	120(E)	GLY	16.8
1	3-A	120(E)	GLY	16.8
1	4-A	120(E)	GLY	16.8
1	5-A	120(E)	GLY	16.8
1	6-A	120(E)	GLY	16.8
1	7-A	120(E)	GLY	16.8
1	8-A	120(E)	GLY	16.8
1	9-A	120(E)	GLY	16.8
1	10-A	120(E)	GLY	16.8
1	11-A	120(E)	GLY	16.8
1	12-A	120(E)	GLY	16.8
1	13-A	120(E)	GLY	16.8
1	14-A	120(E)	GLY	16.8
1	15-A	120(E)	GLY	16.8
1	16-A	120(E)	GLY	16.8
1	1-A	94	PHE	16.7
1	2-A	94	PHE	16.7
1	3-A	94	PHE	16.7
1	4-A	94	PHE	16.7
1	5-A	94	PHE	16.7
1	6-A	94	PHE	16.7
1	7-A	94	PHE	16.7
1	8-A	94	PHE	16.7
1	9-A	94	PHE	16.7
1	10-A	94	PHE	16.7
1	11-A	94	PHE	16.7
1	12-A	94	PHE	16.7
1	13-A	94	PHE	16.7
1	14-A	94	PHE	16.7
1	15-A	94	PHE	16.7
1	16-A	94	PHE	16.7
1	1-A	66	ILE	16.3
1	2-A	66	ILE	16.3
1	3-A	66	ILE	16.3
1	4-A	66	ILE	16.3
1	5-A	66	ILE	16.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	66	ILE	16.3
1	7-A	66	ILE	16.3
1	8-A	66	ILE	16.3
1	9-A	66	ILE	16.3
1	10-A	66	ILE	16.3
1	11-A	66	ILE	16.3
1	12-A	66	ILE	16.3
1	13-A	66	ILE	16.3
1	14-A	66	ILE	16.3
1	15-A	66	ILE	16.3
1	16-A	66	ILE	16.3
1	1-A	222	ILE	16.2
1	2-A	222	ILE	16.2
1	3-A	222	ILE	16.2
1	4-A	222	ILE	16.2
1	5-A	222	ILE	16.2
1	6-A	222	ILE	16.2
1	7-A	222	ILE	16.2
1	8-A	222	ILE	16.2
1	9-A	222	ILE	16.2
1	10-A	222	ILE	16.2
1	11-A	222	ILE	16.2
1	12-A	222	ILE	16.2
1	13-A	222	ILE	16.2
1	14-A	222	ILE	16.2
1	15-A	222	ILE	16.2
1	16-A	222	ILE	16.2
1	1-A	89	ALA	16.2
1	2-A	89	ALA	16.2
1	3-A	89	ALA	16.2
1	4-A	89	ALA	16.2
1	5-A	89	ALA	16.2
1	6-A	89	ALA	16.2
1	7-A	89	ALA	16.2
1	8-A	89	ALA	16.2
1	9-A	89	ALA	16.2
1	10-A	89	ALA	16.2
1	11-A	89	ALA	16.2
1	12-A	89	ALA	16.2
1	13-A	89	ALA	16.2
1	14-A	89	ALA	16.2
1	15-A	89	ALA	16.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	89	ALA	16.2
1	1-A	159	CYS	15.8
1	1-A	220(A)	CYS	15.8
1	2-A	159	CYS	15.8
1	2-A	220(A)	CYS	15.8
1	3-A	159	CYS	15.8
1	3-A	220(A)	CYS	15.8
1	4-A	159	CYS	15.8
1	4-A	220(A)	CYS	15.8
1	5-A	159	CYS	15.8
1	5-A	220(A)	CYS	15.8
1	6-A	159	CYS	15.8
1	6-A	220(A)	CYS	15.8
1	7-A	159	CYS	15.8
1	7-A	220(A)	CYS	15.8
1	8-A	159	CYS	15.8
1	8-A	220(A)	CYS	15.8
1	9-A	159	CYS	15.8
1	9-A	220(A)	CYS	15.8
1	10-A	159	CYS	15.8
1	10-A	220(A)	CYS	15.8
1	11-A	159	CYS	15.8
1	11-A	220(A)	CYS	15.8
1	12-A	159	CYS	15.8
1	12-A	220(A)	CYS	15.8
1	13-A	159	CYS	15.8
1	13-A	220(A)	CYS	15.8
1	14-A	159	CYS	15.8
1	14-A	220(A)	CYS	15.8
1	15-A	159	CYS	15.8
1	15-A	220(A)	CYS	15.8
1	16-A	159	CYS	15.8
1	16-A	220(A)	CYS	15.8
1	1-A	222(B)	ALA	15.4
1	2-A	222(B)	ALA	15.4
1	3-A	222(B)	ALA	15.4
1	4-A	222(B)	ALA	15.4
1	5-A	222(B)	ALA	15.4
1	6-A	222(B)	ALA	15.4
1	7-A	222(B)	ALA	15.4
1	8-A	222(B)	ALA	15.4
1	9-A	222(B)	ALA	15.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	222(B)	ALA	15.4
1	11-A	222(B)	ALA	15.4
1	12-A	222(B)	ALA	15.4
1	13-A	222(B)	ALA	15.4
1	14-A	222(B)	ALA	15.4
1	15-A	222(B)	ALA	15.4
1	16-A	222(B)	ALA	15.4
1	1-A	49	THR	15.1
1	2-A	49	THR	15.1
1	3-A	49	THR	15.1
1	4-A	49	THR	15.1
1	5-A	49	THR	15.1
1	6-A	49	THR	15.1
1	7-A	49	THR	15.1
1	8-A	49	THR	15.1
1	9-A	49	THR	15.1
1	10-A	49	THR	15.1
1	11-A	49	THR	15.1
1	12-A	49	THR	15.1
1	13-A	49	THR	15.1
1	14-A	49	THR	15.1
1	15-A	49	THR	15.1
1	16-A	49	THR	15.1
1	1-A	242	LEU	15.0
1	2-A	242	LEU	15.0
1	3-A	242	LEU	15.0
1	4-A	242	LEU	15.0
1	5-A	242	LEU	15.0
1	6-A	242	LEU	15.0
1	7-A	242	LEU	15.0
1	8-A	242	LEU	15.0
1	9-A	242	LEU	15.0
1	10-A	242	LEU	15.0
1	11-A	242	LEU	15.0
1	12-A	242	LEU	15.0
1	13-A	242	LEU	15.0
1	14-A	242	LEU	15.0
1	15-A	242	LEU	15.0
1	16-A	242	LEU	15.0
1	1-A	201(A)	SER	15.0
1	2-A	201(A)	SER	15.0
1	3-A	201(A)	SER	15.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	201(A)	SER	15.0
1	5-A	201(A)	SER	15.0
1	6-A	201(A)	SER	15.0
1	7-A	201(A)	SER	15.0
1	8-A	201(A)	SER	15.0
1	9-A	201(A)	SER	15.0
1	10-A	201(A)	SER	15.0
1	11-A	201(A)	SER	15.0
1	12-A	201(A)	SER	15.0
1	13-A	201(A)	SER	15.0
1	14-A	201(A)	SER	15.0
1	15-A	201(A)	SER	15.0
1	16-A	201(A)	SER	15.0
1	1-A	245	GLY	14.9
1	2-A	245	GLY	14.9
1	3-A	245	GLY	14.9
1	4-A	245	GLY	14.9
1	5-A	245	GLY	14.9
1	6-A	245	GLY	14.9
1	7-A	245	GLY	14.9
1	8-A	245	GLY	14.9
1	9-A	245	GLY	14.9
1	10-A	245	GLY	14.9
1	11-A	245	GLY	14.9
1	12-A	245	GLY	14.9
1	13-A	245	GLY	14.9
1	14-A	245	GLY	14.9
1	15-A	245	GLY	14.9
1	16-A	245	GLY	14.9
1	1-A	48(B)	GLY	14.8
1	2-A	48(B)	GLY	14.8
1	3-A	48(B)	GLY	14.8
1	4-A	48(B)	GLY	14.8
1	5-A	48(B)	GLY	14.8
1	6-A	48(B)	GLY	14.8
1	7-A	48(B)	GLY	14.8
1	8-A	48(B)	GLY	14.8
1	9-A	48(B)	GLY	14.8
1	10-A	48(B)	GLY	14.8
1	11-A	48(B)	GLY	14.8
1	12-A	48(B)	GLY	14.8
1	13-A	48(B)	GLY	14.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	14-A	48(B)	GLY	14.8
1	15-A	48(B)	GLY	14.8
1	16-A	48(B)	GLY	14.8
1	1-A	120(H)	SER	14.7
1	2-A	120(H)	SER	14.7
1	3-A	120(H)	SER	14.7
1	4-A	120(H)	SER	14.7
1	5-A	120(H)	SER	14.7
1	6-A	120(H)	SER	14.7
1	7-A	120(H)	SER	14.7
1	8-A	120(H)	SER	14.7
1	9-A	120(H)	SER	14.7
1	10-A	120(H)	SER	14.7
1	11-A	120(H)	SER	14.7
1	12-A	120(H)	SER	14.7
1	13-A	120(H)	SER	14.7
1	14-A	120(H)	SER	14.7
1	15-A	120(H)	SER	14.7
1	16-A	120(H)	SER	14.7
1	1-A	131	ALA	14.6
1	2-A	131	ALA	14.6
1	3-A	131	ALA	14.6
1	4-A	131	ALA	14.6
1	5-A	131	ALA	14.6
1	6-A	131	ALA	14.6
1	7-A	131	ALA	14.6
1	8-A	131	ALA	14.6
1	9-A	131	ALA	14.6
1	10-A	131	ALA	14.6
1	11-A	131	ALA	14.6
1	12-A	131	ALA	14.6
1	13-A	131	ALA	14.6
1	14-A	131	ALA	14.6
1	15-A	131	ALA	14.6
1	16-A	131	ALA	14.6
1	1-A	45	PHE	14.5
1	2-A	45	PHE	14.5
1	3-A	45	PHE	14.5
1	4-A	45	PHE	14.5
1	5-A	45	PHE	14.5
1	6-A	45	PHE	14.5
1	7-A	45	PHE	14.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	45	PHE	14.5
1	9-A	45	PHE	14.5
1	10-A	45	PHE	14.5
1	11-A	45	PHE	14.5
1	12-A	45	PHE	14.5
1	13-A	45	PHE	14.5
1	14-A	45	PHE	14.5
1	15-A	45	PHE	14.5
1	16-A	45	PHE	14.5
1	1-A	238	TYR	14.3
1	2-A	238	TYR	14.3
1	3-A	238	TYR	14.3
1	4-A	238	TYR	14.3
1	5-A	238	TYR	14.3
1	6-A	238	TYR	14.3
1	7-A	238	TYR	14.3
1	8-A	238	TYR	14.3
1	9-A	238	TYR	14.3
1	10-A	238	TYR	14.3
1	11-A	238	TYR	14.3
1	12-A	238	TYR	14.3
1	13-A	238	TYR	14.3
1	14-A	238	TYR	14.3
1	15-A	238	TYR	14.3
1	16-A	238	TYR	14.3
1	1-A	42	CYS	14.2
1	2-A	42	CYS	14.2
1	3-A	42	CYS	14.2
1	4-A	42	CYS	14.2
1	5-A	42	CYS	14.2
1	6-A	42	CYS	14.2
1	7-A	42	CYS	14.2
1	8-A	42	CYS	14.2
1	9-A	42	CYS	14.2
1	10-A	42	CYS	14.2
1	11-A	42	CYS	14.2
1	12-A	42	CYS	14.2
1	13-A	42	CYS	14.2
1	14-A	42	CYS	14.2
1	15-A	42	CYS	14.2
1	16-A	42	CYS	14.2
1	1-A	67	GLY	14.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	67	GLY	14.2
1	3-A	67	GLY	14.2
1	4-A	67	GLY	14.2
1	5-A	67	GLY	14.2
1	6-A	67	GLY	14.2
1	7-A	67	GLY	14.2
1	8-A	67	GLY	14.2
1	9-A	67	GLY	14.2
1	10-A	67	GLY	14.2
1	11-A	67	GLY	14.2
1	12-A	67	GLY	14.2
1	13-A	67	GLY	14.2
1	14-A	67	GLY	14.2
1	15-A	67	GLY	14.2
1	16-A	67	GLY	14.2
1	1-A	47	VAL	14.2
1	2-A	47	VAL	14.2
1	3-A	47	VAL	14.2
1	4-A	47	VAL	14.2
1	5-A	47	VAL	14.2
1	6-A	47	VAL	14.2
1	7-A	47	VAL	14.2
1	8-A	47	VAL	14.2
1	9-A	47	VAL	14.2
1	10-A	47	VAL	14.2
1	11-A	47	VAL	14.2
1	12-A	47	VAL	14.2
1	13-A	47	VAL	14.2
1	14-A	47	VAL	14.2
1	15-A	47	VAL	14.2
1	16-A	47	VAL	14.2
1	1-A	120(D)	ASN	14.2
1	2-A	120(D)	ASN	14.2
1	3-A	120(D)	ASN	14.2
1	4-A	120(D)	ASN	14.2
1	5-A	120(D)	ASN	14.2
1	6-A	120(D)	ASN	14.2
1	7-A	120(D)	ASN	14.2
1	8-A	120(D)	ASN	14.2
1	9-A	120(D)	ASN	14.2
1	10-A	120(D)	ASN	14.2
1	11-A	120(D)	ASN	14.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	120(D)	ASN	14.2
1	13-A	120(D)	ASN	14.2
1	14-A	120(D)	ASN	14.2
1	15-A	120(D)	ASN	14.2
1	16-A	120(D)	ASN	14.2
1	1-A	40	SER	14.1
1	2-A	40	SER	14.1
1	3-A	40	SER	14.1
1	4-A	40	SER	14.1
1	5-A	40	SER	14.1
1	6-A	40	SER	14.1
1	7-A	40	SER	14.1
1	8-A	40	SER	14.1
1	9-A	40	SER	14.1
1	10-A	40	SER	14.1
1	11-A	40	SER	14.1
1	12-A	40	SER	14.1
1	13-A	40	SER	14.1
1	14-A	40	SER	14.1
1	15-A	40	SER	14.1
1	16-A	40	SER	14.1
1	1-A	233	PRO	14.1
1	2-A	233	PRO	14.1
1	3-A	233	PRO	14.1
1	4-A	233	PRO	14.1
1	5-A	233	PRO	14.1
1	6-A	233	PRO	14.1
1	7-A	233	PRO	14.1
1	8-A	233	PRO	14.1
1	9-A	233	PRO	14.1
1	10-A	233	PRO	14.1
1	11-A	233	PRO	14.1
1	12-A	233	PRO	14.1
1	13-A	233	PRO	14.1
1	14-A	233	PRO	14.1
1	15-A	233	PRO	14.1
1	16-A	233	PRO	14.1
1	1-A	88(A)	ALA	14.1
1	2-A	88(A)	ALA	14.1
1	3-A	88(A)	ALA	14.1
1	4-A	88(A)	ALA	14.1
1	5-A	88(A)	ALA	14.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	88(A)	ALA	14.1
1	7-A	88(A)	ALA	14.1
1	8-A	88(A)	ALA	14.1
1	9-A	88(A)	ALA	14.1
1	10-A	88(A)	ALA	14.1
1	11-A	88(A)	ALA	14.1
1	12-A	88(A)	ALA	14.1
1	13-A	88(A)	ALA	14.1
1	14-A	88(A)	ALA	14.1
1	15-A	88(A)	ALA	14.1
1	16-A	88(A)	ALA	14.1
1	1-A	113	THR	14.1
1	2-A	113	THR	14.1
1	3-A	113	THR	14.1
1	4-A	113	THR	14.1
1	5-A	113	THR	14.1
1	6-A	113	THR	14.1
1	7-A	113	THR	14.1
1	8-A	113	THR	14.1
1	9-A	113	THR	14.1
1	10-A	113	THR	14.1
1	11-A	113	THR	14.1
1	12-A	113	THR	14.1
1	13-A	113	THR	14.1
1	14-A	113	THR	14.1
1	15-A	113	THR	14.1
1	16-A	113	THR	14.1
1	1-A	16	ILE	14.1
1	2-A	16	ILE	14.1
1	3-A	16	ILE	14.1
1	4-A	16	ILE	14.1
1	5-A	16	ILE	14.1
1	6-A	16	ILE	14.1
1	7-A	16	ILE	14.1
1	8-A	16	ILE	14.1
1	9-A	16	ILE	14.1
1	10-A	16	ILE	14.1
1	11-A	16	ILE	14.1
1	12-A	16	ILE	14.1
1	13-A	16	ILE	14.1
1	14-A	16	ILE	14.1
1	15-A	16	ILE	14.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	16	ILE	14.1
1	1-A	135	ALA	14.0
1	2-A	135	ALA	14.0
1	3-A	135	ALA	14.0
1	4-A	135	ALA	14.0
1	5-A	135	ALA	14.0
1	6-A	135	ALA	14.0
1	7-A	135	ALA	14.0
1	8-A	135	ALA	14.0
1	9-A	135	ALA	14.0
1	10-A	135	ALA	14.0
1	11-A	135	ALA	14.0
1	12-A	135	ALA	14.0
1	13-A	135	ALA	14.0
1	14-A	135	ALA	14.0
1	15-A	135	ALA	14.0
1	16-A	135	ALA	14.0
1	1-A	180	LEU	14.0
1	2-A	180	LEU	14.0
1	3-A	180	LEU	14.0
1	4-A	180	LEU	14.0
1	5-A	180	LEU	14.0
1	6-A	180	LEU	14.0
1	7-A	180	LEU	14.0
1	8-A	180	LEU	14.0
1	9-A	180	LEU	14.0
1	10-A	180	LEU	14.0
1	11-A	180	LEU	14.0
1	12-A	180	LEU	14.0
1	13-A	180	LEU	14.0
1	14-A	180	LEU	14.0
1	15-A	180	LEU	14.0
1	16-A	180	LEU	14.0
1	1-A	81	GLY	14.0
1	2-A	81	GLY	14.0
1	3-A	81	GLY	14.0
1	4-A	81	GLY	14.0
1	5-A	81	GLY	14.0
1	6-A	81	GLY	14.0
1	7-A	81	GLY	14.0
1	8-A	81	GLY	14.0
1	9-A	81	GLY	14.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	81	GLY	14.0
1	11-A	81	GLY	14.0
1	12-A	81	GLY	14.0
1	13-A	81	GLY	14.0
1	14-A	81	GLY	14.0
1	15-A	81	GLY	14.0
1	16-A	81	GLY	14.0
1	1-A	120(K)	THR	14.0
1	2-A	120(K)	THR	14.0
1	3-A	120(K)	THR	14.0
1	4-A	120(K)	THR	14.0
1	5-A	120(K)	THR	14.0
1	6-A	120(K)	THR	14.0
1	7-A	120(K)	THR	14.0
1	8-A	120(K)	THR	14.0
1	9-A	120(K)	THR	14.0
1	10-A	120(K)	THR	14.0
1	11-A	120(K)	THR	14.0
1	12-A	120(K)	THR	14.0
1	13-A	120(K)	THR	14.0
1	14-A	120(K)	THR	14.0
1	15-A	120(K)	THR	14.0
1	16-A	120(K)	THR	14.0
1	1-A	82	ALA	13.9
1	2-A	82	ALA	13.9
1	3-A	82	ALA	13.9
1	4-A	82	ALA	13.9
1	5-A	82	ALA	13.9
1	6-A	82	ALA	13.9
1	7-A	82	ALA	13.9
1	8-A	82	ALA	13.9
1	9-A	82	ALA	13.9
1	10-A	82	ALA	13.9
1	11-A	82	ALA	13.9
1	12-A	82	ALA	13.9
1	13-A	82	ALA	13.9
1	14-A	82	ALA	13.9
1	15-A	82	ALA	13.9
1	16-A	82	ALA	13.9
1	1-A	176	ALA	13.9
1	2-A	176	ALA	13.9
1	3-A	176	ALA	13.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	176	ALA	13.9
1	5-A	176	ALA	13.9
1	6-A	176	ALA	13.9
1	7-A	176	ALA	13.9
1	8-A	176	ALA	13.9
1	9-A	176	ALA	13.9
1	10-A	176	ALA	13.9
1	11-A	176	ALA	13.9
1	12-A	176	ALA	13.9
1	13-A	176	ALA	13.9
1	14-A	176	ALA	13.9
1	15-A	176	ALA	13.9
1	16-A	176	ALA	13.9
1	1-A	231	LEU	13.9
1	2-A	231	LEU	13.9
1	3-A	231	LEU	13.9
1	4-A	231	LEU	13.9
1	5-A	231	LEU	13.9
1	6-A	231	LEU	13.9
1	7-A	231	LEU	13.9
1	8-A	231	LEU	13.9
1	9-A	231	LEU	13.9
1	10-A	231	LEU	13.9
1	11-A	231	LEU	13.9
1	12-A	231	LEU	13.9
1	13-A	231	LEU	13.9
1	14-A	231	LEU	13.9
1	15-A	231	LEU	13.9
1	16-A	231	LEU	13.9
1	1-A	243	VAL	13.8
1	2-A	243	VAL	13.8
1	3-A	243	VAL	13.8
1	4-A	243	VAL	13.8
1	5-A	243	VAL	13.8
1	6-A	243	VAL	13.8
1	7-A	243	VAL	13.8
1	8-A	243	VAL	13.8
1	9-A	243	VAL	13.8
1	10-A	243	VAL	13.8
1	11-A	243	VAL	13.8
1	12-A	243	VAL	13.8
1	13-A	243	VAL	13.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	14-A	243	VAL	13.8
1	15-A	243	VAL	13.8
1	16-A	243	VAL	13.8
1	1-A	200	ILE	13.7
1	2-A	200	ILE	13.7
1	3-A	200	ILE	13.7
1	4-A	200	ILE	13.7
1	5-A	200	ILE	13.7
1	6-A	200	ILE	13.7
1	7-A	200	ILE	13.7
1	8-A	200	ILE	13.7
1	9-A	200	ILE	13.7
1	10-A	200	ILE	13.7
1	11-A	200	ILE	13.7
1	12-A	200	ILE	13.7
1	13-A	200	ILE	13.7
1	14-A	200	ILE	13.7
1	15-A	200	ILE	13.7
1	16-A	200	ILE	13.7
1	1-A	38	ASN	13.7
1	2-A	38	ASN	13.7
1	3-A	38	ASN	13.7
1	4-A	38	ASN	13.7
1	5-A	38	ASN	13.7
1	6-A	38	ASN	13.7
1	7-A	38	ASN	13.7
1	8-A	38	ASN	13.7
1	9-A	38	ASN	13.7
1	10-A	38	ASN	13.7
1	11-A	38	ASN	13.7
1	12-A	38	ASN	13.7
1	13-A	38	ASN	13.7
1	14-A	38	ASN	13.7
1	15-A	38	ASN	13.7
1	16-A	38	ASN	13.7
1	1-A	167	VAL	13.6
1	2-A	167	VAL	13.6
1	3-A	167	VAL	13.6
1	4-A	167	VAL	13.6
1	5-A	167	VAL	13.6
1	6-A	167	VAL	13.6
1	7-A	167	VAL	13.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	167	VAL	13.6
1	9-A	167	VAL	13.6
1	10-A	167	VAL	13.6
1	11-A	167	VAL	13.6
1	12-A	167	VAL	13.6
1	13-A	167	VAL	13.6
1	14-A	167	VAL	13.6
1	15-A	167	VAL	13.6
1	16-A	167	VAL	13.6
1	1-A	15(B)	ASN	13.6
1	2-A	15(B)	ASN	13.6
1	3-A	15(B)	ASN	13.6
1	4-A	15(B)	ASN	13.6
1	5-A	15(B)	ASN	13.6
1	6-A	15(B)	ASN	13.6
1	7-A	15(B)	ASN	13.6
1	8-A	15(B)	ASN	13.6
1	9-A	15(B)	ASN	13.6
1	10-A	15(B)	ASN	13.6
1	11-A	15(B)	ASN	13.6
1	12-A	15(B)	ASN	13.6
1	13-A	15(B)	ASN	13.6
1	14-A	15(B)	ASN	13.6
1	15-A	15(B)	ASN	13.6
1	16-A	15(B)	ASN	13.6
1	1-A	105	TRP	13.6
1	2-A	105	TRP	13.6
1	3-A	105	TRP	13.6
1	4-A	105	TRP	13.6
1	5-A	105	TRP	13.6
1	6-A	105	TRP	13.6
1	7-A	105	TRP	13.6
1	8-A	105	TRP	13.6
1	9-A	105	TRP	13.6
1	10-A	105	TRP	13.6
1	11-A	105	TRP	13.6
1	12-A	105	TRP	13.6
1	13-A	105	TRP	13.6
1	14-A	105	TRP	13.6
1	15-A	105	TRP	13.6
1	16-A	105	TRP	13.6
1	1-A	84	VAL	13.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	84	VAL	13.5
1	3-A	84	VAL	13.5
1	4-A	84	VAL	13.5
1	5-A	84	VAL	13.5
1	6-A	84	VAL	13.5
1	7-A	84	VAL	13.5
1	8-A	84	VAL	13.5
1	9-A	84	VAL	13.5
1	10-A	84	VAL	13.5
1	11-A	84	VAL	13.5
1	12-A	84	VAL	13.5
1	13-A	84	VAL	13.5
1	14-A	84	VAL	13.5
1	15-A	84	VAL	13.5
1	16-A	84	VAL	13.5
1	1-A	48	THR	13.5
1	2-A	48	THR	13.5
1	3-A	48	THR	13.5
1	4-A	48	THR	13.5
1	5-A	48	THR	13.5
1	6-A	48	THR	13.5
1	7-A	48	THR	13.5
1	8-A	48	THR	13.5
1	9-A	48	THR	13.5
1	10-A	48	THR	13.5
1	11-A	48	THR	13.5
1	12-A	48	THR	13.5
1	13-A	48	THR	13.5
1	14-A	48	THR	13.5
1	15-A	48	THR	13.5
1	16-A	48	THR	13.5
1	1-A	240	LEU	13.5
1	2-A	240	LEU	13.5
1	3-A	240	LEU	13.5
1	4-A	240	LEU	13.5
1	5-A	240	LEU	13.5
1	6-A	240	LEU	13.5
1	7-A	240	LEU	13.5
1	8-A	240	LEU	13.5
1	9-A	240	LEU	13.5
1	10-A	240	LEU	13.5
1	11-A	240	LEU	13.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	240	LEU	13.5
1	13-A	240	LEU	13.5
1	14-A	240	LEU	13.5
1	15-A	240	LEU	13.5
1	16-A	240	LEU	13.5
1	1-A	219(B)	ASN	13.4
1	2-A	219(B)	ASN	13.4
1	3-A	219(B)	ASN	13.4
1	4-A	219(B)	ASN	13.4
1	5-A	219(B)	ASN	13.4
1	6-A	219(B)	ASN	13.4
1	7-A	219(B)	ASN	13.4
1	8-A	219(B)	ASN	13.4
1	9-A	219(B)	ASN	13.4
1	10-A	219(B)	ASN	13.4
1	11-A	219(B)	ASN	13.4
1	12-A	219(B)	ASN	13.4
1	13-A	219(B)	ASN	13.4
1	14-A	219(B)	ASN	13.4
1	15-A	219(B)	ASN	13.4
1	16-A	219(B)	ASN	13.4
1	1-A	122	ARG	13.4
1	2-A	122	ARG	13.4
1	3-A	122	ARG	13.4
1	4-A	122	ARG	13.4
1	5-A	122	ARG	13.4
1	6-A	122	ARG	13.4
1	7-A	122	ARG	13.4
1	8-A	122	ARG	13.4
1	9-A	122	ARG	13.4
1	10-A	122	ARG	13.4
1	11-A	122	ARG	13.4
1	12-A	122	ARG	13.4
1	13-A	122	ARG	13.4
1	14-A	122	ARG	13.4
1	15-A	122	ARG	13.4
1	16-A	122	ARG	13.4
1	1-A	108	LEU	13.4
1	2-A	108	LEU	13.4
1	3-A	108	LEU	13.4
1	4-A	108	LEU	13.4
1	5-A	108	LEU	13.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	108	LEU	13.4
1	7-A	108	LEU	13.4
1	8-A	108	LEU	13.4
1	9-A	108	LEU	13.4
1	10-A	108	LEU	13.4
1	11-A	108	LEU	13.4
1	12-A	108	LEU	13.4
1	13-A	108	LEU	13.4
1	14-A	108	LEU	13.4
1	15-A	108	LEU	13.4
1	16-A	108	LEU	13.4
1	1-A	134	ALA	13.4
1	2-A	134	ALA	13.4
1	3-A	134	ALA	13.4
1	4-A	134	ALA	13.4
1	5-A	134	ALA	13.4
1	6-A	134	ALA	13.4
1	7-A	134	ALA	13.4
1	8-A	134	ALA	13.4
1	9-A	134	ALA	13.4
1	10-A	134	ALA	13.4
1	11-A	134	ALA	13.4
1	12-A	134	ALA	13.4
1	13-A	134	ALA	13.4
1	14-A	134	ALA	13.4
1	15-A	134	ALA	13.4
1	16-A	134	ALA	13.4
1	1-A	58	CYS	13.3
1	2-A	58	CYS	13.3
1	3-A	58	CYS	13.3
1	4-A	58	CYS	13.3
1	5-A	58	CYS	13.3
1	6-A	58	CYS	13.3
1	7-A	58	CYS	13.3
1	8-A	58	CYS	13.3
1	9-A	58	CYS	13.3
1	10-A	58	CYS	13.3
1	11-A	58	CYS	13.3
1	12-A	58	CYS	13.3
1	13-A	58	CYS	13.3
1	14-A	58	CYS	13.3
1	15-A	58	CYS	13.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	58	CYS	13.3
1	1-A	221	GLY	13.2
1	2-A	221	GLY	13.2
1	3-A	221	GLY	13.2
1	4-A	221	GLY	13.2
1	5-A	221	GLY	13.2
1	6-A	221	GLY	13.2
1	7-A	221	GLY	13.2
1	8-A	221	GLY	13.2
1	9-A	221	GLY	13.2
1	10-A	221	GLY	13.2
1	11-A	221	GLY	13.2
1	12-A	221	GLY	13.2
1	13-A	221	GLY	13.2
1	14-A	221	GLY	13.2
1	15-A	221	GLY	13.2
1	16-A	221	GLY	13.2
1	1-A	244	THR	13.2
1	2-A	244	THR	13.2
1	3-A	244	THR	13.2
1	4-A	244	THR	13.2
1	5-A	244	THR	13.2
1	6-A	244	THR	13.2
1	7-A	244	THR	13.2
1	8-A	244	THR	13.2
1	9-A	244	THR	13.2
1	10-A	244	THR	13.2
1	11-A	244	THR	13.2
1	12-A	244	THR	13.2
1	13-A	244	THR	13.2
1	14-A	244	THR	13.2
1	15-A	244	THR	13.2
1	16-A	244	THR	13.2
1	1-A	57	HIS	13.2
1	2-A	57	HIS	13.2
1	3-A	57	HIS	13.2
1	4-A	57	HIS	13.2
1	5-A	57	HIS	13.2
1	6-A	57	HIS	13.2
1	7-A	57	HIS	13.2
1	8-A	57	HIS	13.2
1	9-A	57	HIS	13.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	57	HIS	13.2
1	11-A	57	HIS	13.2
1	12-A	57	HIS	13.2
1	13-A	57	HIS	13.2
1	14-A	57	HIS	13.2
1	15-A	57	HIS	13.2
1	16-A	57	HIS	13.2
1	1-A	162	ILE	13.1
1	2-A	162	ILE	13.1
1	3-A	162	ILE	13.1
1	4-A	162	ILE	13.1
1	5-A	162	ILE	13.1
1	6-A	162	ILE	13.1
1	7-A	162	ILE	13.1
1	8-A	162	ILE	13.1
1	9-A	162	ILE	13.1
1	10-A	162	ILE	13.1
1	11-A	162	ILE	13.1
1	12-A	162	ILE	13.1
1	13-A	162	ILE	13.1
1	14-A	162	ILE	13.1
1	15-A	162	ILE	13.1
1	16-A	162	ILE	13.1
1	1-A	59(A)	THR	12.9
1	2-A	59(A)	THR	12.9
1	3-A	59(A)	THR	12.9
1	4-A	59(A)	THR	12.9
1	5-A	59(A)	THR	12.9
1	6-A	59(A)	THR	12.9
1	7-A	59(A)	THR	12.9
1	8-A	59(A)	THR	12.9
1	9-A	59(A)	THR	12.9
1	10-A	59(A)	THR	12.9
1	11-A	59(A)	THR	12.9
1	12-A	59(A)	THR	12.9
1	13-A	59(A)	THR	12.9
1	14-A	59(A)	THR	12.9
1	15-A	59(A)	THR	12.9
1	16-A	59(A)	THR	12.9
1	1-A	230	ARG	12.9
1	2-A	230	ARG	12.9
1	3-A	230	ARG	12.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	230	ARG	12.9
1	5-A	230	ARG	12.9
1	6-A	230	ARG	12.9
1	7-A	230	ARG	12.9
1	8-A	230	ARG	12.9
1	9-A	230	ARG	12.9
1	10-A	230	ARG	12.9
1	11-A	230	ARG	12.9
1	12-A	230	ARG	12.9
1	13-A	230	ARG	12.9
1	14-A	230	ARG	12.9
1	15-A	230	ARG	12.9
1	16-A	230	ARG	12.9
1	1-A	119	LEU	12.9
1	2-A	119	LEU	12.9
1	3-A	119	LEU	12.9
1	4-A	119	LEU	12.9
1	5-A	119	LEU	12.9
1	6-A	119	LEU	12.9
1	7-A	119	LEU	12.9
1	8-A	119	LEU	12.9
1	9-A	119	LEU	12.9
1	10-A	119	LEU	12.9
1	11-A	119	LEU	12.9
1	12-A	119	LEU	12.9
1	13-A	119	LEU	12.9
1	14-A	119	LEU	12.9
1	15-A	119	LEU	12.9
1	16-A	119	LEU	12.9
1	1-A	88	PHE	12.9
1	2-A	88	PHE	12.9
1	3-A	88	PHE	12.9
1	4-A	88	PHE	12.9
1	5-A	88	PHE	12.9
1	6-A	88	PHE	12.9
1	7-A	88	PHE	12.9
1	8-A	88	PHE	12.9
1	9-A	88	PHE	12.9
1	10-A	88	PHE	12.9
1	11-A	88	PHE	12.9
1	12-A	88	PHE	12.9
1	13-A	88	PHE	12.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	14-A	88	PHE	12.9
1	15-A	88	PHE	12.9
1	16-A	88	PHE	12.9
1	1-A	195	SER	12.8
1	2-A	195	SER	12.8
1	3-A	195	SER	12.8
1	4-A	195	SER	12.8
1	5-A	195	SER	12.8
1	6-A	195	SER	12.8
1	7-A	195	SER	12.8
1	8-A	195	SER	12.8
1	9-A	195	SER	12.8
1	10-A	195	SER	12.8
1	11-A	195	SER	12.8
1	12-A	195	SER	12.8
1	13-A	195	SER	12.8
1	14-A	195	SER	12.8
1	15-A	195	SER	12.8
1	16-A	195	SER	12.8
1	1-A	120(J)	VAL	12.5
1	2-A	120(J)	VAL	12.5
1	3-A	120(J)	VAL	12.5
1	4-A	120(J)	VAL	12.5
1	5-A	120(J)	VAL	12.5
1	6-A	120(J)	VAL	12.5
1	7-A	120(J)	VAL	12.5
1	8-A	120(J)	VAL	12.5
1	9-A	120(J)	VAL	12.5
1	10-A	120(J)	VAL	12.5
1	11-A	120(J)	VAL	12.5
1	12-A	120(J)	VAL	12.5
1	13-A	120(J)	VAL	12.5
1	14-A	120(J)	VAL	12.5
1	15-A	120(J)	VAL	12.5
1	16-A	120(J)	VAL	12.5
1	1-A	222(A)	PRO	12.5
1	2-A	222(A)	PRO	12.5
1	3-A	222(A)	PRO	12.5
1	4-A	222(A)	PRO	12.5
1	5-A	222(A)	PRO	12.5
1	6-A	222(A)	PRO	12.5
1	7-A	222(A)	PRO	12.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	222(A)	PRO	12.5
1	9-A	222(A)	PRO	12.5
1	10-A	222(A)	PRO	12.5
1	11-A	222(A)	PRO	12.5
1	12-A	222(A)	PRO	12.5
1	13-A	222(A)	PRO	12.5
1	14-A	222(A)	PRO	12.5
1	15-A	222(A)	PRO	12.5
1	16-A	222(A)	PRO	12.5
1	1-A	227	LEU	12.4
1	2-A	227	LEU	12.4
1	3-A	227	LEU	12.4
1	4-A	227	LEU	12.4
1	5-A	227	LEU	12.4
1	6-A	227	LEU	12.4
1	7-A	227	LEU	12.4
1	8-A	227	LEU	12.4
1	9-A	227	LEU	12.4
1	10-A	227	LEU	12.4
1	11-A	227	LEU	12.4
1	12-A	227	LEU	12.4
1	13-A	227	LEU	12.4
1	14-A	227	LEU	12.4
1	15-A	227	LEU	12.4
1	16-A	227	LEU	12.4
1	1-A	114	LEU	12.4
1	2-A	114	LEU	12.4
1	3-A	114	LEU	12.4
1	4-A	114	LEU	12.4
1	5-A	114	LEU	12.4
1	6-A	114	LEU	12.4
1	7-A	114	LEU	12.4
1	8-A	114	LEU	12.4
1	9-A	114	LEU	12.4
1	10-A	114	LEU	12.4
1	11-A	114	LEU	12.4
1	12-A	114	LEU	12.4
1	13-A	114	LEU	12.4
1	14-A	114	LEU	12.4
1	15-A	114	LEU	12.4
1	16-A	114	LEU	12.4
1	1-A	142	THR	12.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	142	THR	12.4
1	3-A	142	THR	12.4
1	4-A	142	THR	12.4
1	5-A	142	THR	12.4
1	6-A	142	THR	12.4
1	7-A	142	THR	12.4
1	8-A	142	THR	12.4
1	9-A	142	THR	12.4
1	10-A	142	THR	12.4
1	11-A	142	THR	12.4
1	12-A	142	THR	12.4
1	13-A	142	THR	12.4
1	14-A	142	THR	12.4
1	15-A	142	THR	12.4
1	16-A	142	THR	12.4
1	1-A	168	THR	12.4
1	2-A	168	THR	12.4
1	3-A	168	THR	12.4
1	4-A	168	THR	12.4
1	5-A	168	THR	12.4
1	6-A	168	THR	12.4
1	7-A	168	THR	12.4
1	8-A	168	THR	12.4
1	9-A	168	THR	12.4
1	10-A	168	THR	12.4
1	11-A	168	THR	12.4
1	12-A	168	THR	12.4
1	13-A	168	THR	12.4
1	14-A	168	THR	12.4
1	15-A	168	THR	12.4
1	16-A	168	THR	12.4
1	1-A	136	VAL	12.3
1	2-A	136	VAL	12.3
1	3-A	136	VAL	12.3
1	4-A	136	VAL	12.3
1	5-A	136	VAL	12.3
1	6-A	136	VAL	12.3
1	7-A	136	VAL	12.3
1	8-A	136	VAL	12.3
1	9-A	136	VAL	12.3
1	10-A	136	VAL	12.3
1	11-A	136	VAL	12.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	136	VAL	12.3
1	13-A	136	VAL	12.3
1	14-A	136	VAL	12.3
1	15-A	136	VAL	12.3
1	16-A	136	VAL	12.3
1	1-A	232	GLN	12.3
1	2-A	232	GLN	12.3
1	3-A	232	GLN	12.3
1	4-A	232	GLN	12.3
1	5-A	232	GLN	12.3
1	6-A	232	GLN	12.3
1	7-A	232	GLN	12.3
1	8-A	232	GLN	12.3
1	9-A	232	GLN	12.3
1	10-A	232	GLN	12.3
1	11-A	232	GLN	12.3
1	12-A	232	GLN	12.3
1	13-A	232	GLN	12.3
1	14-A	232	GLN	12.3
1	15-A	232	GLN	12.3
1	16-A	232	GLN	12.3
1	1-A	17	VAL	12.1
1	2-A	17	VAL	12.1
1	3-A	17	VAL	12.1
1	4-A	17	VAL	12.1
1	5-A	17	VAL	12.1
1	6-A	17	VAL	12.1
1	7-A	17	VAL	12.1
1	8-A	17	VAL	12.1
1	9-A	17	VAL	12.1
1	10-A	17	VAL	12.1
1	11-A	17	VAL	12.1
1	12-A	17	VAL	12.1
1	13-A	17	VAL	12.1
1	14-A	17	VAL	12.1
1	15-A	17	VAL	12.1
1	16-A	17	VAL	12.1
1	1-A	241	SER	12.0
1	2-A	241	SER	12.0
1	3-A	241	SER	12.0
1	4-A	241	SER	12.0
1	5-A	241	SER	12.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	241	SER	12.0
1	7-A	241	SER	12.0
1	8-A	241	SER	12.0
1	9-A	241	SER	12.0
1	10-A	241	SER	12.0
1	11-A	241	SER	12.0
1	12-A	241	SER	12.0
1	13-A	241	SER	12.0
1	14-A	241	SER	12.0
1	15-A	241	SER	12.0
1	16-A	241	SER	12.0
1	1-A	161	THR	12.0
1	2-A	161	THR	12.0
1	3-A	161	THR	12.0
1	4-A	161	THR	12.0
1	5-A	161	THR	12.0
1	6-A	161	THR	12.0
1	7-A	161	THR	12.0
1	8-A	161	THR	12.0
1	9-A	161	THR	12.0
1	10-A	161	THR	12.0
1	11-A	161	THR	12.0
1	12-A	161	THR	12.0
1	13-A	161	THR	12.0
1	14-A	161	THR	12.0
1	15-A	161	THR	12.0
1	16-A	161	THR	12.0
1	1-A	143	THR	11.9
1	2-A	143	THR	11.9
1	3-A	143	THR	11.9
1	4-A	143	THR	11.9
1	5-A	143	THR	11.9
1	6-A	143	THR	11.9
1	7-A	143	THR	11.9
1	8-A	143	THR	11.9
1	9-A	143	THR	11.9
1	10-A	143	THR	11.9
1	11-A	143	THR	11.9
1	12-A	143	THR	11.9
1	13-A	143	THR	11.9
1	14-A	143	THR	11.9
1	15-A	143	THR	11.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	143	THR	11.9
1	1-A	179	GLY	11.9
1	2-A	179	GLY	11.9
1	3-A	179	GLY	11.9
1	4-A	179	GLY	11.9
1	5-A	179	GLY	11.9
1	6-A	179	GLY	11.9
1	7-A	179	GLY	11.9
1	8-A	179	GLY	11.9
1	9-A	179	GLY	11.9
1	10-A	179	GLY	11.9
1	11-A	179	GLY	11.9
1	12-A	179	GLY	11.9
1	13-A	179	GLY	11.9
1	14-A	179	GLY	11.9
1	15-A	179	GLY	11.9
1	16-A	179	GLY	11.9
1	1-A	212	VAL	11.8
1	2-A	212	VAL	11.8
1	3-A	212	VAL	11.8
1	4-A	212	VAL	11.8
1	5-A	212	VAL	11.8
1	6-A	212	VAL	11.8
1	7-A	212	VAL	11.8
1	8-A	212	VAL	11.8
1	9-A	212	VAL	11.8
1	10-A	212	VAL	11.8
1	11-A	212	VAL	11.8
1	12-A	212	VAL	11.8
1	13-A	212	VAL	11.8
1	14-A	212	VAL	11.8
1	15-A	212	VAL	11.8
1	16-A	212	VAL	11.8
1	1-A	235	LEU	11.8
1	2-A	235	LEU	11.8
1	3-A	235	LEU	11.8
1	4-A	235	LEU	11.8
1	5-A	235	LEU	11.8
1	6-A	235	LEU	11.8
1	7-A	235	LEU	11.8
1	8-A	235	LEU	11.8
1	9-A	235	LEU	11.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	235	LEU	11.8
1	11-A	235	LEU	11.8
1	12-A	235	LEU	11.8
1	13-A	235	LEU	11.8
1	14-A	235	LEU	11.8
1	15-A	235	LEU	11.8
1	16-A	235	LEU	11.8
1	1-A	133	GLY	11.8
1	1-A	193	GLY	11.8
1	2-A	133	GLY	11.8
1	2-A	193	GLY	11.8
1	3-A	133	GLY	11.8
1	3-A	193	GLY	11.8
1	4-A	133	GLY	11.8
1	4-A	193	GLY	11.8
1	5-A	133	GLY	11.8
1	5-A	193	GLY	11.8
1	6-A	133	GLY	11.8
1	6-A	193	GLY	11.8
1	7-A	133	GLY	11.8
1	7-A	193	GLY	11.8
1	8-A	133	GLY	11.8
1	8-A	193	GLY	11.8
1	9-A	133	GLY	11.8
1	9-A	193	GLY	11.8
1	10-A	133	GLY	11.8
1	10-A	193	GLY	11.8
1	11-A	133	GLY	11.8
1	11-A	193	GLY	11.8
1	12-A	133	GLY	11.8
1	12-A	193	GLY	11.8
1	13-A	133	GLY	11.8
1	13-A	193	GLY	11.8
1	14-A	133	GLY	11.8
1	14-A	193	GLY	11.8
1	15-A	133	GLY	11.8
1	15-A	193	GLY	11.8
1	16-A	133	GLY	11.8
1	16-A	193	GLY	11.8
1	1-A	177	VAL	11.8
1	2-A	177	VAL	11.8
1	3-A	177	VAL	11.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	177	VAL	11.8
1	5-A	177	VAL	11.8
1	6-A	177	VAL	11.8
1	7-A	177	VAL	11.8
1	8-A	177	VAL	11.8
1	9-A	177	VAL	11.8
1	10-A	177	VAL	11.8
1	11-A	177	VAL	11.8
1	12-A	177	VAL	11.8
1	13-A	177	VAL	11.8
1	14-A	177	VAL	11.8
1	15-A	177	VAL	11.8
1	16-A	177	VAL	11.8
1	1-A	44	VAL	11.7
1	2-A	44	VAL	11.7
1	3-A	44	VAL	11.7
1	4-A	44	VAL	11.7
1	5-A	44	VAL	11.7
1	6-A	44	VAL	11.7
1	7-A	44	VAL	11.7
1	8-A	44	VAL	11.7
1	9-A	44	VAL	11.7
1	10-A	44	VAL	11.7
1	11-A	44	VAL	11.7
1	12-A	44	VAL	11.7
1	13-A	44	VAL	11.7
1	14-A	44	VAL	11.7
1	15-A	44	VAL	11.7
1	16-A	44	VAL	11.7
1	1-A	111	ALA	11.7
1	2-A	111	ALA	11.7
1	3-A	111	ALA	11.7
1	4-A	111	ALA	11.7
1	5-A	111	ALA	11.7
1	6-A	111	ALA	11.7
1	7-A	111	ALA	11.7
1	8-A	111	ALA	11.7
1	9-A	111	ALA	11.7
1	10-A	111	ALA	11.7
1	11-A	111	ALA	11.7
1	12-A	111	ALA	11.7
1	13-A	111	ALA	11.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	14-A	111	ALA	11.7
1	15-A	111	ALA	11.7
1	16-A	111	ALA	11.7
1	1-A	228	PHE	11.6
1	2-A	228	PHE	11.6
1	3-A	228	PHE	11.6
1	4-A	228	PHE	11.6
1	5-A	228	PHE	11.6
1	6-A	228	PHE	11.6
1	7-A	228	PHE	11.6
1	8-A	228	PHE	11.6
1	9-A	228	PHE	11.6
1	10-A	228	PHE	11.6
1	11-A	228	PHE	11.6
1	12-A	228	PHE	11.6
1	13-A	228	PHE	11.6
1	14-A	228	PHE	11.6
1	15-A	228	PHE	11.6
1	16-A	228	PHE	11.6
1	1-A	137	CYS	11.6
1	2-A	137	CYS	11.6
1	3-A	137	CYS	11.6
1	4-A	137	CYS	11.6
1	5-A	137	CYS	11.6
1	6-A	137	CYS	11.6
1	7-A	137	CYS	11.6
1	8-A	137	CYS	11.6
1	9-A	137	CYS	11.6
1	10-A	137	CYS	11.6
1	11-A	137	CYS	11.6
1	12-A	137	CYS	11.6
1	13-A	137	CYS	11.6
1	14-A	137	CYS	11.6
1	15-A	137	CYS	11.6
1	16-A	137	CYS	11.6
1	1-A	170	ASN	11.5
1	2-A	170	ASN	11.5
1	3-A	170	ASN	11.5
1	4-A	170	ASN	11.5
1	5-A	170	ASN	11.5
1	6-A	170	ASN	11.5
1	7-A	170	ASN	11.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	170	ASN	11.5
1	9-A	170	ASN	11.5
1	10-A	170	ASN	11.5
1	11-A	170	ASN	11.5
1	12-A	170	ASN	11.5
1	13-A	170	ASN	11.5
1	14-A	170	ASN	11.5
1	15-A	170	ASN	11.5
1	16-A	170	ASN	11.5
1	1-A	130	ALA	11.5
1	2-A	130	ALA	11.5
1	3-A	130	ALA	11.5
1	4-A	130	ALA	11.5
1	5-A	130	ALA	11.5
1	6-A	130	ALA	11.5
1	7-A	130	ALA	11.5
1	8-A	130	ALA	11.5
1	9-A	130	ALA	11.5
1	10-A	130	ALA	11.5
1	11-A	130	ALA	11.5
1	12-A	130	ALA	11.5
1	13-A	130	ALA	11.5
1	14-A	130	ALA	11.5
1	15-A	130	ALA	11.5
1	16-A	130	ALA	11.5
1	1-A	201	THR	11.4
1	2-A	201	THR	11.4
1	3-A	201	THR	11.4
1	4-A	201	THR	11.4
1	5-A	201	THR	11.4
1	6-A	201	THR	11.4
1	7-A	201	THR	11.4
1	8-A	201	THR	11.4
1	9-A	201	THR	11.4
1	10-A	201	THR	11.4
1	11-A	201	THR	11.4
1	12-A	201	THR	11.4
1	13-A	201	THR	11.4
1	14-A	201	THR	11.4
1	15-A	201	THR	11.4
1	16-A	201	THR	11.4
1	1-A	62	THR	11.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	62	THR	11.4
1	3-A	62	THR	11.4
1	4-A	62	THR	11.4
1	5-A	62	THR	11.4
1	6-A	62	THR	11.4
1	7-A	62	THR	11.4
1	8-A	62	THR	11.4
1	9-A	62	THR	11.4
1	10-A	62	THR	11.4
1	11-A	62	THR	11.4
1	12-A	62	THR	11.4
1	13-A	62	THR	11.4
1	14-A	62	THR	11.4
1	15-A	62	THR	11.4
1	16-A	62	THR	11.4
1	1-A	216	GLY	11.3
1	2-A	216	GLY	11.3
1	3-A	216	GLY	11.3
1	4-A	216	GLY	11.3
1	5-A	216	GLY	11.3
1	6-A	216	GLY	11.3
1	7-A	216	GLY	11.3
1	8-A	216	GLY	11.3
1	9-A	216	GLY	11.3
1	10-A	216	GLY	11.3
1	11-A	216	GLY	11.3
1	12-A	216	GLY	11.3
1	13-A	216	GLY	11.3
1	14-A	216	GLY	11.3
1	15-A	216	GLY	11.3
1	16-A	216	GLY	11.3
1	1-A	19	GLY	11.3
1	2-A	19	GLY	11.3
1	3-A	19	GLY	11.3
1	4-A	19	GLY	11.3
1	5-A	19	GLY	11.3
1	6-A	19	GLY	11.3
1	7-A	19	GLY	11.3
1	8-A	19	GLY	11.3
1	9-A	19	GLY	11.3
1	10-A	19	GLY	11.3
1	11-A	19	GLY	11.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	19	GLY	11.3
1	13-A	19	GLY	11.3
1	14-A	19	GLY	11.3
1	15-A	19	GLY	11.3
1	16-A	19	GLY	11.3
1	1-A	101	ASN	11.3
1	2-A	101	ASN	11.3
1	3-A	101	ASN	11.3
1	4-A	101	ASN	11.3
1	5-A	101	ASN	11.3
1	6-A	101	ASN	11.3
1	7-A	101	ASN	11.3
1	8-A	101	ASN	11.3
1	9-A	101	ASN	11.3
1	10-A	101	ASN	11.3
1	11-A	101	ASN	11.3
1	12-A	101	ASN	11.3
1	13-A	101	ASN	11.3
1	14-A	101	ASN	11.3
1	15-A	101	ASN	11.3
1	16-A	101	ASN	11.3
1	1-A	222(C)	SER	11.3
1	2-A	222(C)	SER	11.3
1	3-A	222(C)	SER	11.3
1	4-A	222(C)	SER	11.3
1	5-A	222(C)	SER	11.3
1	6-A	222(C)	SER	11.3
1	7-A	222(C)	SER	11.3
1	8-A	222(C)	SER	11.3
1	9-A	222(C)	SER	11.3
1	10-A	222(C)	SER	11.3
1	11-A	222(C)	SER	11.3
1	12-A	222(C)	SER	11.3
1	13-A	222(C)	SER	11.3
1	14-A	222(C)	SER	11.3
1	15-A	222(C)	SER	11.3
1	16-A	222(C)	SER	11.3
1	1-A	120(C)	ALA	11.1
1	2-A	120(C)	ALA	11.1
1	3-A	120(C)	ALA	11.1
1	4-A	120(C)	ALA	11.1
1	5-A	120(C)	ALA	11.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	120(C)	ALA	11.1
1	7-A	120(C)	ALA	11.1
1	8-A	120(C)	ALA	11.1
1	9-A	120(C)	ALA	11.1
1	10-A	120(C)	ALA	11.1
1	11-A	120(C)	ALA	11.1
1	12-A	120(C)	ALA	11.1
1	13-A	120(C)	ALA	11.1
1	14-A	120(C)	ALA	11.1
1	15-A	120(C)	ALA	11.1
1	16-A	120(C)	ALA	11.1
1	1-A	192	ARG	11.0
1	2-A	192	ARG	11.0
1	3-A	192	ARG	11.0
1	4-A	192	ARG	11.0
1	5-A	192	ARG	11.0
1	6-A	192	ARG	11.0
1	7-A	192	ARG	11.0
1	8-A	192	ARG	11.0
1	9-A	192	ARG	11.0
1	10-A	192	ARG	11.0
1	11-A	192	ARG	11.0
1	12-A	192	ARG	11.0
1	13-A	192	ARG	11.0
1	14-A	192	ARG	11.0
1	15-A	192	ARG	11.0
1	16-A	192	ARG	11.0
1	1-A	121	VAL	10.9
1	2-A	121	VAL	10.9
1	3-A	121	VAL	10.9
1	4-A	121	VAL	10.9
1	5-A	121	VAL	10.9
1	6-A	121	VAL	10.9
1	7-A	121	VAL	10.9
1	8-A	121	VAL	10.9
1	9-A	121	VAL	10.9
1	10-A	121	VAL	10.9
1	11-A	121	VAL	10.9
1	12-A	121	VAL	10.9
1	13-A	121	VAL	10.9
1	14-A	121	VAL	10.9
1	15-A	121	VAL	10.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	121	VAL	10.9
1	1-A	106	VAL	10.9
1	2-A	106	VAL	10.9
1	3-A	106	VAL	10.9
1	4-A	106	VAL	10.9
1	5-A	106	VAL	10.9
1	6-A	106	VAL	10.9
1	7-A	106	VAL	10.9
1	8-A	106	VAL	10.9
1	9-A	106	VAL	10.9
1	10-A	106	VAL	10.9
1	11-A	106	VAL	10.9
1	12-A	106	VAL	10.9
1	13-A	106	VAL	10.9
1	14-A	106	VAL	10.9
1	15-A	106	VAL	10.9
1	16-A	106	VAL	10.9
1	1-A	36	ASN	10.8
1	2-A	36	ASN	10.8
1	3-A	36	ASN	10.8
1	4-A	36	ASN	10.8
1	5-A	36	ASN	10.8
1	6-A	36	ASN	10.8
1	7-A	36	ASN	10.8
1	8-A	36	ASN	10.8
1	9-A	36	ASN	10.8
1	10-A	36	ASN	10.8
1	11-A	36	ASN	10.8
1	12-A	36	ASN	10.8
1	13-A	36	ASN	10.8
1	14-A	36	ASN	10.8
1	15-A	36	ASN	10.8
1	16-A	36	ASN	10.8
1	1-A	160	GLY	10.7
1	2-A	160	GLY	10.7
1	3-A	160	GLY	10.7
1	4-A	160	GLY	10.7
1	5-A	160	GLY	10.7
1	6-A	160	GLY	10.7
1	7-A	160	GLY	10.7
1	8-A	160	GLY	10.7
1	9-A	160	GLY	10.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	160	GLY	10.7
1	11-A	160	GLY	10.7
1	12-A	160	GLY	10.7
1	13-A	160	GLY	10.7
1	14-A	160	GLY	10.7
1	15-A	160	GLY	10.7
1	16-A	160	GLY	10.7
1	1-A	156	GLY	10.6
1	2-A	156	GLY	10.6
1	3-A	156	GLY	10.6
1	4-A	156	GLY	10.6
1	5-A	156	GLY	10.6
1	6-A	156	GLY	10.6
1	7-A	156	GLY	10.6
1	8-A	156	GLY	10.6
1	9-A	156	GLY	10.6
1	10-A	156	GLY	10.6
1	11-A	156	GLY	10.6
1	12-A	156	GLY	10.6
1	13-A	156	GLY	10.6
1	14-A	156	GLY	10.6
1	15-A	156	GLY	10.6
1	16-A	156	GLY	10.6
1	1-A	215	GLY	10.5
1	2-A	215	GLY	10.5
1	3-A	215	GLY	10.5
1	4-A	215	GLY	10.5
1	5-A	215	GLY	10.5
1	6-A	215	GLY	10.5
1	7-A	215	GLY	10.5
1	8-A	215	GLY	10.5
1	9-A	215	GLY	10.5
1	10-A	215	GLY	10.5
1	11-A	215	GLY	10.5
1	12-A	215	GLY	10.5
1	13-A	215	GLY	10.5
1	14-A	215	GLY	10.5
1	15-A	215	GLY	10.5
1	16-A	215	GLY	10.5
1	1-A	163	THR	10.4
1	2-A	163	THR	10.4
1	3-A	163	THR	10.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	163	THR	10.4
1	5-A	163	THR	10.4
1	6-A	163	THR	10.4
1	7-A	163	THR	10.4
1	8-A	163	THR	10.4
1	9-A	163	THR	10.4
1	10-A	163	THR	10.4
1	11-A	163	THR	10.4
1	12-A	163	THR	10.4
1	13-A	163	THR	10.4
1	14-A	163	THR	10.4
1	15-A	163	THR	10.4
1	16-A	163	THR	10.4
1	1-A	164	ALA	10.3
1	2-A	164	ALA	10.3
1	3-A	164	ALA	10.3
1	4-A	164	ALA	10.3
1	5-A	164	ALA	10.3
1	6-A	164	ALA	10.3
1	7-A	164	ALA	10.3
1	8-A	164	ALA	10.3
1	9-A	164	ALA	10.3
1	10-A	164	ALA	10.3
1	11-A	164	ALA	10.3
1	12-A	164	ALA	10.3
1	13-A	164	ALA	10.3
1	14-A	164	ALA	10.3
1	15-A	164	ALA	10.3
1	16-A	164	ALA	10.3
1	1-A	125	THR	10.3
1	2-A	125	THR	10.3
1	3-A	125	THR	10.3
1	4-A	125	THR	10.3
1	5-A	125	THR	10.3
1	6-A	125	THR	10.3
1	7-A	125	THR	10.3
1	8-A	125	THR	10.3
1	9-A	125	THR	10.3
1	10-A	125	THR	10.3
1	11-A	125	THR	10.3
1	12-A	125	THR	10.3
1	13-A	125	THR	10.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	14-A	125	THR	10.3
1	15-A	125	THR	10.3
1	16-A	125	THR	10.3
1	1-A	34	SER	10.1
1	2-A	34	SER	10.1
1	3-A	34	SER	10.1
1	4-A	34	SER	10.1
1	5-A	34	SER	10.1
1	6-A	34	SER	10.1
1	7-A	34	SER	10.1
1	8-A	34	SER	10.1
1	9-A	34	SER	10.1
1	10-A	34	SER	10.1
1	11-A	34	SER	10.1
1	12-A	34	SER	10.1
1	13-A	34	SER	10.1
1	14-A	34	SER	10.1
1	15-A	34	SER	10.1
1	16-A	34	SER	10.1
1	1-A	175	GLY	10.1
1	2-A	175	GLY	10.1
1	3-A	175	GLY	10.1
1	4-A	175	GLY	10.1
1	5-A	175	GLY	10.1
1	6-A	175	GLY	10.1
1	7-A	175	GLY	10.1
1	8-A	175	GLY	10.1
1	9-A	175	GLY	10.1
1	10-A	175	GLY	10.1
1	11-A	175	GLY	10.1
1	12-A	175	GLY	10.1
1	13-A	175	GLY	10.1
1	14-A	175	GLY	10.1
1	15-A	175	GLY	10.1
1	16-A	175	GLY	10.1
1	1-A	48(A)	ARG	10.1
1	2-A	48(A)	ARG	10.1
1	3-A	48(A)	ARG	10.1
1	4-A	48(A)	ARG	10.1
1	5-A	48(A)	ARG	10.1
1	6-A	48(A)	ARG	10.1
1	7-A	48(A)	ARG	10.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	48(A)	ARG	10.1
1	9-A	48(A)	ARG	10.1
1	10-A	48(A)	ARG	10.1
1	11-A	48(A)	ARG	10.1
1	12-A	48(A)	ARG	10.1
1	13-A	48(A)	ARG	10.1
1	14-A	48(A)	ARG	10.1
1	15-A	48(A)	ARG	10.1
1	16-A	48(A)	ARG	10.1
1	1-A	109	THR	10.0
1	2-A	109	THR	10.0
1	3-A	109	THR	10.0
1	4-A	109	THR	10.0
1	5-A	109	THR	10.0
1	6-A	109	THR	10.0
1	7-A	109	THR	10.0
1	8-A	109	THR	10.0
1	9-A	109	THR	10.0
1	10-A	109	THR	10.0
1	11-A	109	THR	10.0
1	12-A	109	THR	10.0
1	13-A	109	THR	10.0
1	14-A	109	THR	10.0
1	15-A	109	THR	10.0
1	16-A	109	THR	10.0
1	1-A	178	ARG	10.0
1	2-A	178	ARG	10.0
1	3-A	178	ARG	10.0
1	4-A	178	ARG	10.0
1	5-A	178	ARG	10.0
1	6-A	178	ARG	10.0
1	7-A	178	ARG	10.0
1	8-A	178	ARG	10.0
1	9-A	178	ARG	10.0
1	10-A	178	ARG	10.0
1	11-A	178	ARG	10.0
1	12-A	178	ARG	10.0
1	13-A	178	ARG	10.0
1	14-A	178	ARG	10.0
1	15-A	178	ARG	10.0
1	16-A	178	ARG	10.0
1	1-A	223	GLN	10.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	223	GLN	10.0
1	3-A	223	GLN	10.0
1	4-A	223	GLN	10.0
1	5-A	223	GLN	10.0
1	6-A	223	GLN	10.0
1	7-A	223	GLN	10.0
1	8-A	223	GLN	10.0
1	9-A	223	GLN	10.0
1	10-A	223	GLN	10.0
1	11-A	223	GLN	10.0
1	12-A	223	GLN	10.0
1	13-A	223	GLN	10.0
1	14-A	223	GLN	10.0
1	15-A	223	GLN	10.0
1	16-A	223	GLN	10.0
1	1-A	90	ARG	10.0
1	2-A	90	ARG	10.0
1	3-A	90	ARG	10.0
1	4-A	90	ARG	10.0
1	5-A	90	ARG	10.0
1	6-A	90	ARG	10.0
1	7-A	90	ARG	10.0
1	8-A	90	ARG	10.0
1	9-A	90	ARG	10.0
1	10-A	90	ARG	10.0
1	11-A	90	ARG	10.0
1	12-A	90	ARG	10.0
1	13-A	90	ARG	10.0
1	14-A	90	ARG	10.0
1	15-A	90	ARG	10.0
1	16-A	90	ARG	10.0
1	1-A	158	GLN	10.0
1	2-A	158	GLN	10.0
1	3-A	158	GLN	10.0
1	4-A	158	GLN	10.0
1	5-A	158	GLN	10.0
1	6-A	158	GLN	10.0
1	7-A	158	GLN	10.0
1	8-A	158	GLN	10.0
1	9-A	158	GLN	10.0
1	10-A	158	GLN	10.0
1	11-A	158	GLN	10.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	158	GLN	10.0
1	13-A	158	GLN	10.0
1	14-A	158	GLN	10.0
1	15-A	158	GLN	10.0
1	16-A	158	GLN	10.0
1	1-A	199	TRP	9.9
1	2-A	199	TRP	9.9
1	3-A	199	TRP	9.9
1	4-A	199	TRP	9.9
1	5-A	199	TRP	9.9
1	6-A	199	TRP	9.9
1	7-A	199	TRP	9.9
1	8-A	199	TRP	9.9
1	9-A	199	TRP	9.9
1	10-A	199	TRP	9.9
1	11-A	199	TRP	9.9
1	12-A	199	TRP	9.9
1	13-A	199	TRP	9.9
1	14-A	199	TRP	9.9
1	15-A	199	TRP	9.9
1	16-A	199	TRP	9.9
1	1-A	59	GLY	9.9
1	2-A	59	GLY	9.9
1	3-A	59	GLY	9.9
1	4-A	59	GLY	9.9
1	5-A	59	GLY	9.9
1	6-A	59	GLY	9.9
1	7-A	59	GLY	9.9
1	8-A	59	GLY	9.9
1	9-A	59	GLY	9.9
1	10-A	59	GLY	9.9
1	11-A	59	GLY	9.9
1	12-A	59	GLY	9.9
1	13-A	59	GLY	9.9
1	14-A	59	GLY	9.9
1	15-A	59	GLY	9.9
1	16-A	59	GLY	9.9
1	1-A	185	ALA	9.9
1	2-A	185	ALA	9.9
1	3-A	185	ALA	9.9
1	4-A	185	ALA	9.9
1	5-A	185	ALA	9.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	185	ALA	9.9
1	7-A	185	ALA	9.9
1	8-A	185	ALA	9.9
1	9-A	185	ALA	9.9
1	10-A	185	ALA	9.9
1	11-A	185	ALA	9.9
1	12-A	185	ALA	9.9
1	13-A	185	ALA	9.9
1	14-A	185	ALA	9.9
1	15-A	185	ALA	9.9
1	16-A	185	ALA	9.9
1	1-A	60	ASN	9.9
1	2-A	60	ASN	9.9
1	3-A	60	ASN	9.9
1	4-A	60	ASN	9.9
1	5-A	60	ASN	9.9
1	6-A	60	ASN	9.9
1	7-A	60	ASN	9.9
1	8-A	60	ASN	9.9
1	9-A	60	ASN	9.9
1	10-A	60	ASN	9.9
1	11-A	60	ASN	9.9
1	12-A	60	ASN	9.9
1	13-A	60	ASN	9.9
1	14-A	60	ASN	9.9
1	15-A	60	ASN	9.9
1	16-A	60	ASN	9.9
1	1-A	61	ALA	9.7
1	2-A	61	ALA	9.7
1	3-A	61	ALA	9.7
1	4-A	61	ALA	9.7
1	5-A	61	ALA	9.7
1	6-A	61	ALA	9.7
1	7-A	61	ALA	9.7
1	8-A	61	ALA	9.7
1	9-A	61	ALA	9.7
1	10-A	61	ALA	9.7
1	11-A	61	ALA	9.7
1	12-A	61	ALA	9.7
1	13-A	61	ALA	9.7
1	14-A	61	ALA	9.7
1	15-A	61	ALA	9.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	61	ALA	9.7
1	1-A	181	THR	9.7
1	2-A	181	THR	9.7
1	3-A	181	THR	9.7
1	4-A	181	THR	9.7
1	5-A	181	THR	9.7
1	6-A	181	THR	9.7
1	7-A	181	THR	9.7
1	8-A	181	THR	9.7
1	9-A	181	THR	9.7
1	10-A	181	THR	9.7
1	11-A	181	THR	9.7
1	12-A	181	THR	9.7
1	13-A	181	THR	9.7
1	14-A	181	THR	9.7
1	15-A	181	THR	9.7
1	16-A	181	THR	9.7
1	1-A	169	ALA	9.7
1	2-A	169	ALA	9.7
1	3-A	169	ALA	9.7
1	4-A	169	ALA	9.7
1	5-A	169	ALA	9.7
1	6-A	169	ALA	9.7
1	7-A	169	ALA	9.7
1	8-A	169	ALA	9.7
1	9-A	169	ALA	9.7
1	10-A	169	ALA	9.7
1	11-A	169	ALA	9.7
1	12-A	169	ALA	9.7
1	13-A	169	ALA	9.7
1	14-A	169	ALA	9.7
1	15-A	169	ALA	9.7
1	16-A	169	ALA	9.7
1	1-A	33	TYR	9.6
1	2-A	33	TYR	9.6
1	3-A	33	TYR	9.6
1	4-A	33	TYR	9.6
1	5-A	33	TYR	9.6
1	6-A	33	TYR	9.6
1	7-A	33	TYR	9.6
1	8-A	33	TYR	9.6
1	9-A	33	TYR	9.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	33	TYR	9.6
1	11-A	33	TYR	9.6
1	12-A	33	TYR	9.6
1	13-A	33	TYR	9.6
1	14-A	33	TYR	9.6
1	15-A	33	TYR	9.6
1	16-A	33	TYR	9.6
1	1-A	209	ALA	9.6
1	2-A	209	ALA	9.6
1	3-A	209	ALA	9.6
1	4-A	209	ALA	9.6
1	5-A	209	ALA	9.6
1	6-A	209	ALA	9.6
1	7-A	209	ALA	9.6
1	8-A	209	ALA	9.6
1	9-A	209	ALA	9.6
1	10-A	209	ALA	9.6
1	11-A	209	ALA	9.6
1	12-A	209	ALA	9.6
1	13-A	209	ALA	9.6
1	14-A	209	ALA	9.6
1	15-A	209	ALA	9.6
1	16-A	209	ALA	9.6
1	1-A	234	ILE	9.5
1	2-A	234	ILE	9.5
1	3-A	234	ILE	9.5
1	4-A	234	ILE	9.5
1	5-A	234	ILE	9.5
1	6-A	234	ILE	9.5
1	7-A	234	ILE	9.5
1	8-A	234	ILE	9.5
1	9-A	234	ILE	9.5
1	10-A	234	ILE	9.5
1	11-A	234	ILE	9.5
1	12-A	234	ILE	9.5
1	13-A	234	ILE	9.5
1	14-A	234	ILE	9.5
1	15-A	234	ILE	9.5
1	16-A	234	ILE	9.5
1	1-A	100	GLY	9.5
1	2-A	100	GLY	9.5
1	3-A	100	GLY	9.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	100	GLY	9.5
1	5-A	100	GLY	9.5
1	6-A	100	GLY	9.5
1	7-A	100	GLY	9.5
1	8-A	100	GLY	9.5
1	9-A	100	GLY	9.5
1	10-A	100	GLY	9.5
1	11-A	100	GLY	9.5
1	12-A	100	GLY	9.5
1	13-A	100	GLY	9.5
1	14-A	100	GLY	9.5
1	15-A	100	GLY	9.5
1	16-A	100	GLY	9.5
1	1-A	174	GLU	9.4
1	2-A	174	GLU	9.4
1	3-A	174	GLU	9.4
1	4-A	174	GLU	9.4
1	5-A	174	GLU	9.4
1	6-A	174	GLU	9.4
1	7-A	174	GLU	9.4
1	8-A	174	GLU	9.4
1	9-A	174	GLU	9.4
1	10-A	174	GLU	9.4
1	11-A	174	GLU	9.4
1	12-A	174	GLU	9.4
1	13-A	174	GLU	9.4
1	14-A	174	GLU	9.4
1	15-A	174	GLU	9.4
1	16-A	174	GLU	9.4
1	1-A	120(B)	VAL	9.4
1	2-A	120(B)	VAL	9.4
1	3-A	120(B)	VAL	9.4
1	4-A	120(B)	VAL	9.4
1	5-A	120(B)	VAL	9.4
1	6-A	120(B)	VAL	9.4
1	7-A	120(B)	VAL	9.4
1	8-A	120(B)	VAL	9.4
1	9-A	120(B)	VAL	9.4
1	10-A	120(B)	VAL	9.4
1	11-A	120(B)	VAL	9.4
1	12-A	120(B)	VAL	9.4
1	13-A	120(B)	VAL	9.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	14-A	120(B)	VAL	9.4
1	15-A	120(B)	VAL	9.4
1	16-A	120(B)	VAL	9.4
1	1-A	120	PRO	9.4
1	2-A	120	PRO	9.4
1	3-A	120	PRO	9.4
1	4-A	120	PRO	9.4
1	5-A	120	PRO	9.4
1	6-A	120	PRO	9.4
1	7-A	120	PRO	9.4
1	8-A	120	PRO	9.4
1	9-A	120	PRO	9.4
1	10-A	120	PRO	9.4
1	11-A	120	PRO	9.4
1	12-A	120	PRO	9.4
1	13-A	120	PRO	9.4
1	14-A	120	PRO	9.4
1	15-A	120	PRO	9.4
1	16-A	120	PRO	9.4
1	1-A	207	GLY	9.4
1	2-A	207	GLY	9.4
1	3-A	207	GLY	9.4
1	4-A	207	GLY	9.4
1	5-A	207	GLY	9.4
1	6-A	207	GLY	9.4
1	7-A	207	GLY	9.4
1	8-A	207	GLY	9.4
1	9-A	207	GLY	9.4
1	10-A	207	GLY	9.4
1	11-A	207	GLY	9.4
1	12-A	207	GLY	9.4
1	13-A	207	GLY	9.4
1	14-A	207	GLY	9.4
1	15-A	207	GLY	9.4
1	16-A	207	GLY	9.4
1	1-A	166	ASN	9.3
1	2-A	166	ASN	9.3
1	3-A	166	ASN	9.3
1	4-A	166	ASN	9.3
1	5-A	166	ASN	9.3
1	6-A	166	ASN	9.3
1	7-A	166	ASN	9.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	166	ASN	9.3
1	9-A	166	ASN	9.3
1	10-A	166	ASN	9.3
1	11-A	166	ASN	9.3
1	12-A	166	ASN	9.3
1	13-A	166	ASN	9.3
1	14-A	166	ASN	9.3
1	15-A	166	ASN	9.3
1	16-A	166	ASN	9.3
1	1-A	110	SER	9.3
1	2-A	110	SER	9.3
1	3-A	110	SER	9.3
1	4-A	110	SER	9.3
1	5-A	110	SER	9.3
1	6-A	110	SER	9.3
1	7-A	110	SER	9.3
1	8-A	110	SER	9.3
1	9-A	110	SER	9.3
1	10-A	110	SER	9.3
1	11-A	110	SER	9.3
1	12-A	110	SER	9.3
1	13-A	110	SER	9.3
1	14-A	110	SER	9.3
1	15-A	110	SER	9.3
1	16-A	110	SER	9.3
1	1-A	226	SER	9.2
1	2-A	226	SER	9.2
1	3-A	226	SER	9.2
1	4-A	226	SER	9.2
1	5-A	226	SER	9.2
1	6-A	226	SER	9.2
1	7-A	226	SER	9.2
1	8-A	226	SER	9.2
1	9-A	226	SER	9.2
1	10-A	226	SER	9.2
1	11-A	226	SER	9.2
1	12-A	226	SER	9.2
1	13-A	226	SER	9.2
1	14-A	226	SER	9.2
1	15-A	226	SER	9.2
1	16-A	226	SER	9.2
1	1-A	141	ARG	9.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	141	ARG	9.2
1	3-A	141	ARG	9.2
1	4-A	141	ARG	9.2
1	5-A	141	ARG	9.2
1	6-A	141	ARG	9.2
1	7-A	141	ARG	9.2
1	8-A	141	ARG	9.2
1	9-A	141	ARG	9.2
1	10-A	141	ARG	9.2
1	11-A	141	ARG	9.2
1	12-A	141	ARG	9.2
1	13-A	141	ARG	9.2
1	14-A	141	ARG	9.2
1	15-A	141	ARG	9.2
1	16-A	141	ARG	9.2
1	1-A	87	THR	9.1
1	2-A	87	THR	9.1
1	3-A	87	THR	9.1
1	4-A	87	THR	9.1
1	5-A	87	THR	9.1
1	6-A	87	THR	9.1
1	7-A	87	THR	9.1
1	8-A	87	THR	9.1
1	9-A	87	THR	9.1
1	10-A	87	THR	9.1
1	11-A	87	THR	9.1
1	12-A	87	THR	9.1
1	13-A	87	THR	9.1
1	14-A	87	THR	9.1
1	15-A	87	THR	9.1
1	16-A	87	THR	9.1
1	1-A	224	ARG	9.0
1	2-A	224	ARG	9.0
1	3-A	224	ARG	9.0
1	4-A	224	ARG	9.0
1	5-A	224	ARG	9.0
1	6-A	224	ARG	9.0
1	7-A	224	ARG	9.0
1	8-A	224	ARG	9.0
1	9-A	224	ARG	9.0
1	10-A	224	ARG	9.0
1	11-A	224	ARG	9.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	224	ARG	9.0
1	13-A	224	ARG	9.0
1	14-A	224	ARG	9.0
1	15-A	224	ARG	9.0
1	16-A	224	ARG	9.0
1	1-A	219(C)	GLY	9.0
1	2-A	219(C)	GLY	9.0
1	3-A	219(C)	GLY	9.0
1	4-A	219(C)	GLY	9.0
1	5-A	219(C)	GLY	9.0
1	6-A	219(C)	GLY	9.0
1	7-A	219(C)	GLY	9.0
1	8-A	219(C)	GLY	9.0
1	9-A	219(C)	GLY	9.0
1	10-A	219(C)	GLY	9.0
1	11-A	219(C)	GLY	9.0
1	12-A	219(C)	GLY	9.0
1	13-A	219(C)	GLY	9.0
1	14-A	219(C)	GLY	9.0
1	15-A	219(C)	GLY	9.0
1	16-A	219(C)	GLY	9.0
1	1-A	95	PRO	9.0
1	2-A	95	PRO	9.0
1	3-A	95	PRO	9.0
1	4-A	95	PRO	9.0
1	5-A	95	PRO	9.0
1	6-A	95	PRO	9.0
1	7-A	95	PRO	9.0
1	8-A	95	PRO	9.0
1	9-A	95	PRO	9.0
1	10-A	95	PRO	9.0
1	11-A	95	PRO	9.0
1	12-A	95	PRO	9.0
1	13-A	95	PRO	9.0
1	14-A	95	PRO	9.0
1	15-A	95	PRO	9.0
1	16-A	95	PRO	9.0
1	1-A	107	SER	8.9
1	1-A	184	ASN	8.9
1	2-A	107	SER	8.9
1	2-A	184	ASN	8.9
1	3-A	107	SER	8.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	3-A	184	ASN	8.9
1	4-A	107	SER	8.9
1	4-A	184	ASN	8.9
1	5-A	107	SER	8.9
1	5-A	184	ASN	8.9
1	6-A	107	SER	8.9
1	6-A	184	ASN	8.9
1	7-A	107	SER	8.9
1	7-A	184	ASN	8.9
1	8-A	107	SER	8.9
1	8-A	184	ASN	8.9
1	9-A	107	SER	8.9
1	9-A	184	ASN	8.9
1	10-A	107	SER	8.9
1	10-A	184	ASN	8.9
1	11-A	107	SER	8.9
1	11-A	184	ASN	8.9
1	12-A	107	SER	8.9
1	12-A	184	ASN	8.9
1	13-A	107	SER	8.9
1	13-A	184	ASN	8.9
1	14-A	107	SER	8.9
1	14-A	184	ASN	8.9
1	15-A	107	SER	8.9
1	15-A	184	ASN	8.9
1	16-A	107	SER	8.9
1	16-A	184	ASN	8.9
1	1-A	225	SER	8.8
1	2-A	225	SER	8.8
1	3-A	225	SER	8.8
1	4-A	225	SER	8.8
1	5-A	225	SER	8.8
1	6-A	225	SER	8.8
1	7-A	225	SER	8.8
1	8-A	225	SER	8.8
1	9-A	225	SER	8.8
1	10-A	225	SER	8.8
1	11-A	225	SER	8.8
1	12-A	225	SER	8.8
1	13-A	225	SER	8.8
1	14-A	225	SER	8.8
1	15-A	225	SER	8.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	225	SER	8.8
1	1-A	44(A)	GLY	8.8
1	2-A	44(A)	GLY	8.8
1	3-A	44(A)	GLY	8.8
1	4-A	44(A)	GLY	8.8
1	5-A	44(A)	GLY	8.8
1	6-A	44(A)	GLY	8.8
1	7-A	44(A)	GLY	8.8
1	8-A	44(A)	GLY	8.8
1	9-A	44(A)	GLY	8.8
1	10-A	44(A)	GLY	8.8
1	11-A	44(A)	GLY	8.8
1	12-A	44(A)	GLY	8.8
1	13-A	44(A)	GLY	8.8
1	14-A	44(A)	GLY	8.8
1	15-A	44(A)	GLY	8.8
1	16-A	44(A)	GLY	8.8
1	1-A	46	SER	8.7
1	2-A	46	SER	8.7
1	3-A	46	SER	8.7
1	4-A	46	SER	8.7
1	5-A	46	SER	8.7
1	6-A	46	SER	8.7
1	7-A	46	SER	8.7
1	8-A	46	SER	8.7
1	9-A	46	SER	8.7
1	10-A	46	SER	8.7
1	11-A	46	SER	8.7
1	12-A	46	SER	8.7
1	13-A	46	SER	8.7
1	14-A	46	SER	8.7
1	15-A	46	SER	8.7
1	16-A	46	SER	8.7
1	1-A	197	GLY	8.7
1	2-A	197	GLY	8.7
1	3-A	197	GLY	8.7
1	4-A	197	GLY	8.7
1	5-A	197	GLY	8.7
1	6-A	197	GLY	8.7
1	7-A	197	GLY	8.7
1	8-A	197	GLY	8.7
1	9-A	197	GLY	8.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	197	GLY	8.7
1	11-A	197	GLY	8.7
1	12-A	197	GLY	8.7
1	13-A	197	GLY	8.7
1	14-A	197	GLY	8.7
1	15-A	197	GLY	8.7
1	16-A	197	GLY	8.7
1	1-A	140	GLY	8.7
1	2-A	140	GLY	8.7
1	3-A	140	GLY	8.7
1	4-A	140	GLY	8.7
1	5-A	140	GLY	8.7
1	6-A	140	GLY	8.7
1	7-A	140	GLY	8.7
1	8-A	140	GLY	8.7
1	9-A	140	GLY	8.7
1	10-A	140	GLY	8.7
1	11-A	140	GLY	8.7
1	12-A	140	GLY	8.7
1	13-A	140	GLY	8.7
1	14-A	140	GLY	8.7
1	15-A	140	GLY	8.7
1	16-A	140	GLY	8.7
1	1-A	52	PHE	8.6
1	2-A	52	PHE	8.6
1	3-A	52	PHE	8.6
1	4-A	52	PHE	8.6
1	5-A	52	PHE	8.6
1	6-A	52	PHE	8.6
1	7-A	52	PHE	8.6
1	8-A	52	PHE	8.6
1	9-A	52	PHE	8.6
1	10-A	52	PHE	8.6
1	11-A	52	PHE	8.6
1	12-A	52	PHE	8.6
1	13-A	52	PHE	8.6
1	14-A	52	PHE	8.6
1	15-A	52	PHE	8.6
1	16-A	52	PHE	8.6
1	1-A	129	GLU	8.6
1	2-A	129	GLU	8.6
1	3-A	129	GLU	8.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	129	GLU	8.6
1	5-A	129	GLU	8.6
1	6-A	129	GLU	8.6
1	7-A	129	GLU	8.6
1	8-A	129	GLU	8.6
1	9-A	129	GLU	8.6
1	10-A	129	GLU	8.6
1	11-A	129	GLU	8.6
1	12-A	129	GLU	8.6
1	13-A	129	GLU	8.6
1	14-A	129	GLU	8.6
1	15-A	129	GLU	8.6
1	16-A	129	GLU	8.6
1	1-A	219(D)	ASN	8.6
1	2-A	219(D)	ASN	8.6
1	3-A	219(D)	ASN	8.6
1	4-A	219(D)	ASN	8.6
1	5-A	219(D)	ASN	8.6
1	6-A	219(D)	ASN	8.6
1	7-A	219(D)	ASN	8.6
1	8-A	219(D)	ASN	8.6
1	9-A	219(D)	ASN	8.6
1	10-A	219(D)	ASN	8.6
1	11-A	219(D)	ASN	8.6
1	12-A	219(D)	ASN	8.6
1	13-A	219(D)	ASN	8.6
1	14-A	219(D)	ASN	8.6
1	15-A	219(D)	ASN	8.6
1	16-A	219(D)	ASN	8.6
1	1-A	196	GLY	8.5
1	1-A	239	GLY	8.5
1	2-A	196	GLY	8.5
1	2-A	239	GLY	8.5
1	3-A	196	GLY	8.5
1	3-A	239	GLY	8.5
1	4-A	196	GLY	8.5
1	4-A	239	GLY	8.5
1	5-A	196	GLY	8.5
1	5-A	239	GLY	8.5
1	6-A	196	GLY	8.5
1	6-A	239	GLY	8.5
1	7-A	196	GLY	8.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	7-A	239	GLY	8.5
1	8-A	196	GLY	8.5
1	8-A	239	GLY	8.5
1	9-A	196	GLY	8.5
1	9-A	239	GLY	8.5
1	10-A	196	GLY	8.5
1	10-A	239	GLY	8.5
1	11-A	196	GLY	8.5
1	11-A	239	GLY	8.5
1	12-A	196	GLY	8.5
1	12-A	239	GLY	8.5
1	13-A	196	GLY	8.5
1	13-A	239	GLY	8.5
1	14-A	196	GLY	8.5
1	14-A	239	GLY	8.5
1	15-A	196	GLY	8.5
1	15-A	239	GLY	8.5
1	16-A	196	GLY	8.5
1	16-A	239	GLY	8.5
1	1-A	54	THR	8.5
1	2-A	54	THR	8.5
1	3-A	54	THR	8.5
1	4-A	54	THR	8.5
1	5-A	54	THR	8.5
1	6-A	54	THR	8.5
1	7-A	54	THR	8.5
1	8-A	54	THR	8.5
1	9-A	54	THR	8.5
1	10-A	54	THR	8.5
1	11-A	54	THR	8.5
1	12-A	54	THR	8.5
1	13-A	54	THR	8.5
1	14-A	54	THR	8.5
1	15-A	54	THR	8.5
1	16-A	54	THR	8.5
1	1-A	104	ALA	8.4
1	2-A	104	ALA	8.4
1	3-A	104	ALA	8.4
1	4-A	104	ALA	8.4
1	5-A	104	ALA	8.4
1	6-A	104	ALA	8.4
1	7-A	104	ALA	8.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	104	ALA	8.4
1	9-A	104	ALA	8.4
1	10-A	104	ALA	8.4
1	11-A	104	ALA	8.4
1	12-A	104	ALA	8.4
1	13-A	104	ALA	8.4
1	14-A	104	ALA	8.4
1	15-A	104	ALA	8.4
1	16-A	104	ALA	8.4
1	1-A	211	GLY	8.4
1	2-A	211	GLY	8.4
1	3-A	211	GLY	8.4
1	4-A	211	GLY	8.4
1	5-A	211	GLY	8.4
1	6-A	211	GLY	8.4
1	7-A	211	GLY	8.4
1	8-A	211	GLY	8.4
1	9-A	211	GLY	8.4
1	10-A	211	GLY	8.4
1	11-A	211	GLY	8.4
1	12-A	211	GLY	8.4
1	13-A	211	GLY	8.4
1	14-A	211	GLY	8.4
1	15-A	211	GLY	8.4
1	16-A	211	GLY	8.4
1	1-A	53	VAL	8.3
1	2-A	53	VAL	8.3
1	3-A	53	VAL	8.3
1	4-A	53	VAL	8.3
1	5-A	53	VAL	8.3
1	6-A	53	VAL	8.3
1	7-A	53	VAL	8.3
1	8-A	53	VAL	8.3
1	9-A	53	VAL	8.3
1	10-A	53	VAL	8.3
1	11-A	53	VAL	8.3
1	12-A	53	VAL	8.3
1	13-A	53	VAL	8.3
1	14-A	53	VAL	8.3
1	15-A	53	VAL	8.3
1	16-A	53	VAL	8.3
1	1-A	236	SER	8.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	236	SER	8.3
1	3-A	236	SER	8.3
1	4-A	236	SER	8.3
1	5-A	236	SER	8.3
1	6-A	236	SER	8.3
1	7-A	236	SER	8.3
1	8-A	236	SER	8.3
1	9-A	236	SER	8.3
1	10-A	236	SER	8.3
1	11-A	236	SER	8.3
1	12-A	236	SER	8.3
1	13-A	236	SER	8.3
1	14-A	236	SER	8.3
1	15-A	236	SER	8.3
1	16-A	236	SER	8.3
1	1-A	219	GLN	8.1
1	2-A	219	GLN	8.1
1	3-A	219	GLN	8.1
1	4-A	219	GLN	8.1
1	5-A	219	GLN	8.1
1	6-A	219	GLN	8.1
1	7-A	219	GLN	8.1
1	8-A	219	GLN	8.1
1	9-A	219	GLN	8.1
1	10-A	219	GLN	8.1
1	11-A	219	GLN	8.1
1	12-A	219	GLN	8.1
1	13-A	219	GLN	8.1
1	14-A	219	GLN	8.1
1	15-A	219	GLN	8.1
1	16-A	219	GLN	8.1
1	1-A	183	GLY	8.0
1	2-A	183	GLY	8.0
1	3-A	183	GLY	8.0
1	4-A	183	GLY	8.0
1	5-A	183	GLY	8.0
1	6-A	183	GLY	8.0
1	7-A	183	GLY	8.0
1	8-A	183	GLY	8.0
1	9-A	183	GLY	8.0
1	10-A	183	GLY	8.0
1	11-A	183	GLY	8.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	183	GLY	8.0
1	13-A	183	GLY	8.0
1	14-A	183	GLY	8.0
1	15-A	183	GLY	8.0
1	16-A	183	GLY	8.0
1	1-A	112	GLN	8.0
1	2-A	112	GLN	8.0
1	3-A	112	GLN	8.0
1	4-A	112	GLN	8.0
1	5-A	112	GLN	8.0
1	6-A	112	GLN	8.0
1	7-A	112	GLN	8.0
1	8-A	112	GLN	8.0
1	9-A	112	GLN	8.0
1	10-A	112	GLN	8.0
1	11-A	112	GLN	8.0
1	12-A	112	GLN	8.0
1	13-A	112	GLN	8.0
1	14-A	112	GLN	8.0
1	15-A	112	GLN	8.0
1	16-A	112	GLN	8.0
1	1-A	65	ARG	7.9
1	2-A	65	ARG	7.9
1	3-A	65	ARG	7.9
1	4-A	65	ARG	7.9
1	5-A	65	ARG	7.9
1	6-A	65	ARG	7.9
1	7-A	65	ARG	7.9
1	8-A	65	ARG	7.9
1	9-A	65	ARG	7.9
1	10-A	65	ARG	7.9
1	11-A	65	ARG	7.9
1	12-A	65	ARG	7.9
1	13-A	65	ARG	7.9
1	14-A	65	ARG	7.9
1	15-A	65	ARG	7.9
1	16-A	65	ARG	7.9
1	1-A	208	GLN	7.9
1	2-A	208	GLN	7.9
1	3-A	208	GLN	7.9
1	4-A	208	GLN	7.9
1	5-A	208	GLN	7.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	208	GLN	7.9
1	7-A	208	GLN	7.9
1	8-A	208	GLN	7.9
1	9-A	208	GLN	7.9
1	10-A	208	GLN	7.9
1	11-A	208	GLN	7.9
1	12-A	208	GLN	7.9
1	13-A	208	GLN	7.9
1	14-A	208	GLN	7.9
1	15-A	208	GLN	7.9
1	16-A	208	GLN	7.9
1	1-A	194	ASP	7.6
1	2-A	194	ASP	7.6
1	3-A	194	ASP	7.6
1	4-A	194	ASP	7.6
1	5-A	194	ASP	7.6
1	6-A	194	ASP	7.6
1	7-A	194	ASP	7.6
1	8-A	194	ASP	7.6
1	9-A	194	ASP	7.6
1	10-A	194	ASP	7.6
1	11-A	194	ASP	7.6
1	12-A	194	ASP	7.6
1	13-A	194	ASP	7.6
1	14-A	194	ASP	7.6
1	15-A	194	ASP	7.6
1	16-A	194	ASP	7.6
1	1-A	198	SER	7.6
1	2-A	198	SER	7.6
1	3-A	198	SER	7.6
1	4-A	198	SER	7.6
1	5-A	198	SER	7.6
1	6-A	198	SER	7.6
1	7-A	198	SER	7.6
1	8-A	198	SER	7.6
1	9-A	198	SER	7.6
1	10-A	198	SER	7.6
1	11-A	198	SER	7.6
1	12-A	198	SER	7.6
1	13-A	198	SER	7.6
1	14-A	198	SER	7.6
1	15-A	198	SER	7.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	198	SER	7.6
1	1-A	165	LYS	7.6
1	2-A	165	LYS	7.6
1	3-A	165	LYS	7.6
1	4-A	165	LYS	7.6
1	5-A	165	LYS	7.6
1	6-A	165	LYS	7.6
1	7-A	165	LYS	7.6
1	8-A	165	LYS	7.6
1	9-A	165	LYS	7.6
1	10-A	165	LYS	7.6
1	11-A	165	LYS	7.6
1	12-A	165	LYS	7.6
1	13-A	165	LYS	7.6
1	14-A	165	LYS	7.6
1	15-A	165	LYS	7.6
1	16-A	165	LYS	7.6
1	1-A	139	SER	7.5
1	2-A	139	SER	7.5
1	3-A	139	SER	7.5
1	4-A	139	SER	7.5
1	5-A	139	SER	7.5
1	6-A	139	SER	7.5
1	7-A	139	SER	7.5
1	8-A	139	SER	7.5
1	9-A	139	SER	7.5
1	10-A	139	SER	7.5
1	11-A	139	SER	7.5
1	12-A	139	SER	7.5
1	13-A	139	SER	7.5
1	14-A	139	SER	7.5
1	15-A	139	SER	7.5
1	16-A	139	SER	7.5
1	1-A	210	GLN	7.4
1	2-A	210	GLN	7.4
1	3-A	210	GLN	7.4
1	4-A	210	GLN	7.4
1	5-A	210	GLN	7.4
1	6-A	210	GLN	7.4
1	7-A	210	GLN	7.4
1	8-A	210	GLN	7.4
1	9-A	210	GLN	7.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	210	GLN	7.4
1	11-A	210	GLN	7.4
1	12-A	210	GLN	7.4
1	13-A	210	GLN	7.4
1	14-A	210	GLN	7.4
1	15-A	210	GLN	7.4
1	16-A	210	GLN	7.4
1	1-A	237	GLN	7.4
1	2-A	237	GLN	7.4
1	3-A	237	GLN	7.4
1	4-A	237	GLN	7.4
1	5-A	237	GLN	7.4
1	6-A	237	GLN	7.4
1	7-A	237	GLN	7.4
1	8-A	237	GLN	7.4
1	9-A	237	GLN	7.4
1	10-A	237	GLN	7.4
1	11-A	237	GLN	7.4
1	12-A	237	GLN	7.4
1	13-A	237	GLN	7.4
1	14-A	237	GLN	7.4
1	15-A	237	GLN	7.4
1	16-A	237	GLN	7.4
1	1-A	120(A)	ARG	7.4
1	2-A	120(A)	ARG	7.4
1	3-A	120(A)	ARG	7.4
1	4-A	120(A)	ARG	7.4
1	5-A	120(A)	ARG	7.4
1	6-A	120(A)	ARG	7.4
1	7-A	120(A)	ARG	7.4
1	8-A	120(A)	ARG	7.4
1	9-A	120(A)	ARG	7.4
1	10-A	120(A)	ARG	7.4
1	11-A	120(A)	ARG	7.4
1	12-A	120(A)	ARG	7.4
1	13-A	120(A)	ARG	7.4
1	14-A	120(A)	ARG	7.4
1	15-A	120(A)	ARG	7.4
1	16-A	120(A)	ARG	7.4
1	1-A	51	GLY	7.4
1	2-A	51	GLY	7.4
1	3-A	51	GLY	7.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	51	GLY	7.4
1	5-A	51	GLY	7.4
1	6-A	51	GLY	7.4
1	7-A	51	GLY	7.4
1	8-A	51	GLY	7.4
1	9-A	51	GLY	7.4
1	10-A	51	GLY	7.4
1	11-A	51	GLY	7.4
1	12-A	51	GLY	7.4
1	13-A	51	GLY	7.4
1	14-A	51	GLY	7.4
1	15-A	51	GLY	7.4
1	16-A	51	GLY	7.4
1	1-A	213	MET	7.2
1	2-A	213	MET	7.2
1	3-A	213	MET	7.2
1	4-A	213	MET	7.2
1	5-A	213	MET	7.2
1	6-A	213	MET	7.2
1	7-A	213	MET	7.2
1	8-A	213	MET	7.2
1	9-A	213	MET	7.2
1	10-A	213	MET	7.2
1	11-A	213	MET	7.2
1	12-A	213	MET	7.2
1	13-A	213	MET	7.2
1	14-A	213	MET	7.2
1	15-A	213	MET	7.2
1	16-A	213	MET	7.2
1	1-A	85	GLY	7.1
1	2-A	85	GLY	7.1
1	3-A	85	GLY	7.1
1	4-A	85	GLY	7.1
1	5-A	85	GLY	7.1
1	6-A	85	GLY	7.1
1	7-A	85	GLY	7.1
1	8-A	85	GLY	7.1
1	9-A	85	GLY	7.1
1	10-A	85	GLY	7.1
1	11-A	85	GLY	7.1
1	12-A	85	GLY	7.1
1	13-A	85	GLY	7.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	14-A	85	GLY	7.1
1	15-A	85	GLY	7.1
1	16-A	85	GLY	7.1
1	1-A	124	SER	7.1
1	2-A	124	SER	7.1
1	3-A	124	SER	7.1
1	4-A	124	SER	7.1
1	5-A	124	SER	7.1
1	6-A	124	SER	7.1
1	7-A	124	SER	7.1
1	8-A	124	SER	7.1
1	9-A	124	SER	7.1
1	10-A	124	SER	7.1
1	11-A	124	SER	7.1
1	12-A	124	SER	7.1
1	13-A	124	SER	7.1
1	14-A	124	SER	7.1
1	15-A	124	SER	7.1
1	16-A	124	SER	7.1
1	1-A	43	SER	7.0
1	2-A	43	SER	7.0
1	3-A	43	SER	7.0
1	4-A	43	SER	7.0
1	5-A	43	SER	7.0
1	6-A	43	SER	7.0
1	7-A	43	SER	7.0
1	8-A	43	SER	7.0
1	9-A	43	SER	7.0
1	10-A	43	SER	7.0
1	11-A	43	SER	7.0
1	12-A	43	SER	7.0
1	13-A	43	SER	7.0
1	14-A	43	SER	7.0
1	15-A	43	SER	7.0
1	16-A	43	SER	7.0
1	1-A	214	SER	7.0
1	2-A	214	SER	7.0
1	3-A	214	SER	7.0
1	4-A	214	SER	7.0
1	5-A	214	SER	7.0
1	6-A	214	SER	7.0
1	7-A	214	SER	7.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	214	SER	7.0
1	9-A	214	SER	7.0
1	10-A	214	SER	7.0
1	11-A	214	SER	7.0
1	12-A	214	SER	7.0
1	13-A	214	SER	7.0
1	14-A	214	SER	7.0
1	15-A	214	SER	7.0
1	16-A	214	SER	7.0
1	1-A	123	GLY	6.9
1	2-A	123	GLY	6.9
1	3-A	123	GLY	6.9
1	4-A	123	GLY	6.9
1	5-A	123	GLY	6.9
1	6-A	123	GLY	6.9
1	7-A	123	GLY	6.9
1	8-A	123	GLY	6.9
1	9-A	123	GLY	6.9
1	10-A	123	GLY	6.9
1	11-A	123	GLY	6.9
1	12-A	123	GLY	6.9
1	13-A	123	GLY	6.9
1	14-A	123	GLY	6.9
1	15-A	123	GLY	6.9
1	16-A	123	GLY	6.9
1	1-A	190	MET	6.6
1	2-A	190	MET	6.6
1	3-A	190	MET	6.6
1	4-A	190	MET	6.6
1	5-A	190	MET	6.6
1	6-A	190	MET	6.6
1	7-A	190	MET	6.6
1	8-A	190	MET	6.6
1	9-A	190	MET	6.6
1	10-A	190	MET	6.6
1	11-A	190	MET	6.6
1	12-A	190	MET	6.6
1	13-A	190	MET	6.6
1	14-A	190	MET	6.6
1	15-A	190	MET	6.6
1	16-A	190	MET	6.6
1	1-A	64	ALA	6.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	64	ALA	6.6
1	3-A	64	ALA	6.6
1	4-A	64	ALA	6.6
1	5-A	64	ALA	6.6
1	6-A	64	ALA	6.6
1	7-A	64	ALA	6.6
1	8-A	64	ALA	6.6
1	9-A	64	ALA	6.6
1	10-A	64	ALA	6.6
1	11-A	64	ALA	6.6
1	12-A	64	ALA	6.6
1	13-A	64	ALA	6.6
1	14-A	64	ALA	6.6
1	15-A	64	ALA	6.6
1	16-A	64	ALA	6.6
1	1-A	18	GLY	6.5
1	2-A	18	GLY	6.5
1	3-A	18	GLY	6.5
1	4-A	18	GLY	6.5
1	5-A	18	GLY	6.5
1	6-A	18	GLY	6.5
1	7-A	18	GLY	6.5
1	8-A	18	GLY	6.5
1	9-A	18	GLY	6.5
1	10-A	18	GLY	6.5
1	11-A	18	GLY	6.5
1	12-A	18	GLY	6.5
1	13-A	18	GLY	6.5
1	14-A	18	GLY	6.5
1	15-A	18	GLY	6.5
1	16-A	18	GLY	6.5
1	1-A	55	ALA	6.5
1	2-A	55	ALA	6.5
1	3-A	55	ALA	6.5
1	4-A	55	ALA	6.5
1	5-A	55	ALA	6.5
1	6-A	55	ALA	6.5
1	7-A	55	ALA	6.5
1	8-A	55	ALA	6.5
1	9-A	55	ALA	6.5
1	10-A	55	ALA	6.5
1	11-A	55	ALA	6.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	55	ALA	6.5
1	13-A	55	ALA	6.5
1	14-A	55	ALA	6.5
1	15-A	55	ALA	6.5
1	16-A	55	ALA	6.5
1	1-A	56	GLY	6.4
1	2-A	56	GLY	6.4
1	3-A	56	GLY	6.4
1	4-A	56	GLY	6.4
1	5-A	56	GLY	6.4
1	6-A	56	GLY	6.4
1	7-A	56	GLY	6.4
1	8-A	56	GLY	6.4
1	9-A	56	GLY	6.4
1	10-A	56	GLY	6.4
1	11-A	56	GLY	6.4
1	12-A	56	GLY	6.4
1	13-A	56	GLY	6.4
1	14-A	56	GLY	6.4
1	15-A	56	GLY	6.4
1	16-A	56	GLY	6.4
1	1-A	217	ASN	6.4
1	2-A	217	ASN	6.4
1	3-A	217	ASN	6.4
1	4-A	217	ASN	6.4
1	5-A	217	ASN	6.4
1	6-A	217	ASN	6.4
1	7-A	217	ASN	6.4
1	8-A	217	ASN	6.4
1	9-A	217	ASN	6.4
1	10-A	217	ASN	6.4
1	11-A	217	ASN	6.4
1	12-A	217	ASN	6.4
1	13-A	217	ASN	6.4
1	14-A	217	ASN	6.4
1	15-A	217	ASN	6.4
1	16-A	217	ASN	6.4
1	1-A	191	GLY	6.2
1	2-A	191	GLY	6.2
1	3-A	191	GLY	6.2
1	4-A	191	GLY	6.2
1	5-A	191	GLY	6.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	191	GLY	6.2
1	7-A	191	GLY	6.2
1	8-A	191	GLY	6.2
1	9-A	191	GLY	6.2
1	10-A	191	GLY	6.2
1	11-A	191	GLY	6.2
1	12-A	191	GLY	6.2
1	13-A	191	GLY	6.2
1	14-A	191	GLY	6.2
1	15-A	191	GLY	6.2
1	16-A	191	GLY	6.2
1	1-A	50	LYS	6.2
1	2-A	50	LYS	6.2
1	3-A	50	LYS	6.2
1	4-A	50	LYS	6.2
1	5-A	50	LYS	6.2
1	6-A	50	LYS	6.2
1	7-A	50	LYS	6.2
1	8-A	50	LYS	6.2
1	9-A	50	LYS	6.2
1	10-A	50	LYS	6.2
1	11-A	50	LYS	6.2
1	12-A	50	LYS	6.2
1	13-A	50	LYS	6.2
1	14-A	50	LYS	6.2
1	15-A	50	LYS	6.2
1	16-A	50	LYS	6.2
1	1-A	182	GLN	6.0
1	2-A	182	GLN	6.0
1	3-A	182	GLN	6.0
1	4-A	182	GLN	6.0
1	5-A	182	GLN	6.0
1	6-A	182	GLN	6.0
1	7-A	182	GLN	6.0
1	8-A	182	GLN	6.0
1	9-A	182	GLN	6.0
1	10-A	182	GLN	6.0
1	11-A	182	GLN	6.0
1	12-A	182	GLN	6.0
1	13-A	182	GLN	6.0
1	14-A	182	GLN	6.0
1	15-A	182	GLN	6.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	16-A	182	GLN	6.0
1	1-A	32	GLU	6.0
1	2-A	32	GLU	6.0
1	3-A	32	GLU	6.0
1	4-A	32	GLU	6.0
1	5-A	32	GLU	6.0
1	6-A	32	GLU	6.0
1	7-A	32	GLU	6.0
1	8-A	32	GLU	6.0
1	9-A	32	GLU	6.0
1	10-A	32	GLU	6.0
1	11-A	32	GLU	6.0
1	12-A	32	GLU	6.0
1	13-A	32	GLU	6.0
1	14-A	32	GLU	6.0
1	15-A	32	GLU	6.0
1	16-A	32	GLU	6.0
1	1-A	138	ARG	5.9
1	2-A	138	ARG	5.9
1	3-A	138	ARG	5.9
1	4-A	138	ARG	5.9
1	5-A	138	ARG	5.9
1	6-A	138	ARG	5.9
1	7-A	138	ARG	5.9
1	8-A	138	ARG	5.9
1	9-A	138	ARG	5.9
1	10-A	138	ARG	5.9
1	11-A	138	ARG	5.9
1	12-A	138	ARG	5.9
1	13-A	138	ARG	5.9
1	14-A	138	ARG	5.9
1	15-A	138	ARG	5.9
1	16-A	138	ARG	5.9
1	1-A	229	GLU	5.6
1	2-A	229	GLU	5.6
1	3-A	229	GLU	5.6
1	4-A	229	GLU	5.6
1	5-A	229	GLU	5.6
1	6-A	229	GLU	5.6
1	7-A	229	GLU	5.6
1	8-A	229	GLU	5.6
1	9-A	229	GLU	5.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	229	GLU	5.6
1	11-A	229	GLU	5.6
1	12-A	229	GLU	5.6
1	13-A	229	GLU	5.6
1	14-A	229	GLU	5.6
1	15-A	229	GLU	5.6
1	16-A	229	GLU	5.6
1	1-A	103	ARG	5.3
1	2-A	103	ARG	5.3
1	3-A	103	ARG	5.3
1	4-A	103	ARG	5.3
1	5-A	103	ARG	5.3
1	6-A	103	ARG	5.3
1	7-A	103	ARG	5.3
1	8-A	103	ARG	5.3
1	9-A	103	ARG	5.3
1	10-A	103	ARG	5.3
1	11-A	103	ARG	5.3
1	12-A	103	ARG	5.3
1	13-A	103	ARG	5.3
1	14-A	103	ARG	5.3
1	15-A	103	ARG	5.3
1	16-A	103	ARG	5.3
1	1-A	220	ASN	4.9
1	2-A	220	ASN	4.9
1	3-A	220	ASN	4.9
1	4-A	220	ASN	4.9
1	5-A	220	ASN	4.9
1	6-A	220	ASN	4.9
1	7-A	220	ASN	4.9
1	8-A	220	ASN	4.9
1	9-A	220	ASN	4.9
1	10-A	220	ASN	4.9
1	11-A	220	ASN	4.9
1	12-A	220	ASN	4.9
1	13-A	220	ASN	4.9
1	14-A	220	ASN	4.9
1	15-A	220	ASN	4.9
1	16-A	220	ASN	4.9
1	1-A	102	ASP	3.2
1	2-A	102	ASP	3.2
1	3-A	102	ASP	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	102	ASP	3.2
1	5-A	102	ASP	3.2
1	6-A	102	ASP	3.2
1	7-A	102	ASP	3.2
1	8-A	102	ASP	3.2
1	9-A	102	ASP	3.2
1	10-A	102	ASP	3.2
1	11-A	102	ASP	3.2
1	12-A	102	ASP	3.2
1	13-A	102	ASP	3.2
1	14-A	102	ASP	3.2
1	15-A	102	ASP	3.2
1	16-A	102	ASP	3.2

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(Å ²)	Q<0.9
2	SO4	8-A	4	5/5	0.85	0.69	0.31	18,18,19,19	5
2	SO4	2-A	4	5/5	0.85	0.69	0.28	18,18,19,19	5
2	SO4	10-A	4	5/5	0.85	0.69	0.26	18,18,19,19	5
2	SO4	6-A	4	5/5	0.85	0.69	0.12	18,18,19,19	5
2	SO4	13-A	4	5/5	0.85	0.69	0.12	18,18,19,19	5
2	SO4	11-A	4	5/5	0.85	0.69	0.12	18,18,19,19	5
2	SO4	5-A	4	5/5	0.85	0.69	0.12	18,18,19,19	5
2	SO4	4-A	4	5/5	0.85	0.69	0.12	18,18,19,19	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	SO4	7-A	4	5/5	0.85	0.69	0.12	18,18,19,19	5
2	SO4	3-A	4	5/5	0.85	0.69	0.12	18,18,19,19	5
2	SO4	12-A	4	5/5	0.85	0.69	-0.04	18,18,19,19	5
2	SO4	16-A	4	5/5	0.85	0.69	-0.04	18,18,19,19	5
2	SO4	1-A	4	5/5	0.85	0.69	-0.04	18,18,19,19	5
2	SO4	15-A	4	5/5	0.85	0.69	-0.04	18,18,19,19	5
2	SO4	9-A	4	5/5	0.85	0.69	-0.04	18,18,19,19	5
2	SO4	14-A	4	5/5	0.85	0.69	-0.04	18,18,19,19	5
3	TAM	16-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.92	7,8,10,11	8
3	TAM	15-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
3	TAM	3-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
3	TAM	1-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
3	TAM	7-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
3	TAM	14-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
3	TAM	8-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
3	TAM	9-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
3	TAM	12-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
3	TAM	13-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
3	TAM	4-A	1	8/11	0.69	0.50	-0.98	7,8,10,11	8
2	SO4	10-A	2	5/5	0.91	0.46	-1.31	9,9,10,10	5
2	SO4	3-A	2	5/5	0.91	0.46	-1.31	9,9,10,10	5
2	SO4	4-A	2	5/5	0.91	0.46	-1.31	9,9,10,10	5
2	SO4	14-A	2	5/5	0.91	0.46	-1.31	9,9,10,10	5
3	TAM	11-A	1	8/11	0.69	0.50	-1.44	7,8,10,11	8
3	TAM	10-A	1	8/11	0.69	0.50	-1.44	7,8,10,11	8
3	TAM	2-A	1	8/11	0.69	0.50	-1.44	7,8,10,11	8
3	TAM	6-A	1	8/11	0.69	0.50	-1.44	7,8,10,11	8
3	TAM	5-A	1	8/11	0.69	0.50	-1.44	7,8,10,11	8
2	SO4	5-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	1-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	13-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	6-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	16-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	9-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	8-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	7-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	2-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	15-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	14-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	3-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	12-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	4-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	SO4	11-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.46	6,6,6,7	5
2	SO4	10-A	3	5/5	0.98	0.46	-2.47	6,6,6,7	5
2	SO4	12-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	2-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	7-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	16-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	1-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	9-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	5-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	13-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	8-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	15-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	11-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5
2	SO4	6-A	2	5/5	0.91	0.46	-	9,9,10,10	5

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.